

| | |
|-------------|---|
| Title | グラジエント法によるプロセス最適化問題の解析(Dissertation_全文) |
| Author(s) | 大井, 紘 |
| Citation | Kyoto University (京都大学) |
| Issue Date | 1972-11-24 |
| URL | http://dx.doi.org/10.14989/doctor.r2167 |
| Right | |
| Type | Thesis or Dissertation |
| Textversion | author |

グラジエント法によるプロセス最適化問題の解析

大井 紘

| |
|-------|
| 工 |
| 238 函 |
| |

グラジエント法によるプロセス最適化問題の解析

大 井 紘

目 次

| | |
|--|----|
| 総 論 | 1 |
| 第 I 篇 | |
| Davidon-Fletcher-Powell法を中心としたグラジエント法の拡張 | 6 |
| 第 1 章 グラジエント法概説 | 7 |
| § 1 序 | 7 |
| § 2 山登り法とグラジエント法 | 7 |
| § 3 探索方向の決定法 | 8 |
| § 4 共軛方向法概説 | 12 |
| § 5 1次元探索 | 13 |
| § 6 束縛条件の処理 | 15 |
| § 7 目的函数の形状 | 16 |
| § 8 探索の終止規準 | 18 |
| References | 21 |
| 第 2 章 グラジエント法における 1 次元探索法 | 23 |
| § 1 序 | 23 |
| § 2 1次元探索問題 | 23 |
| § 3 修正された 1次元探索法 | 27 |
| § 4 数値計算例 | 35 |
| References | 42 |

| | | |
|-----|---|----|
| 第3章 | Davidon-Fletcher-Powell 法を中心とした共軛方向法 | 44 |
| § 1 | 共軛方向法 | 44 |
| § 2 | 共軛勾配法 | 48 |
| § 3 | Davidon-Fletcher-Powell 法 | 49 |
| | References | 54 |
| 第4章 | Davidon-Fletcher-Powell 法の感度解析への拡張 | 55 |
| § 1 | 序 | 55 |
| § 2 | 感度解析法の数学的基礎 | 55 |
| § 3 | 感度解析法 | 57 |
| § 4 | 検 討 | 59 |
| | References | 61 |
| 第5章 | Davidon-Fletcher-Powell 法の函数空間への拡張とその 計算機構 | 62 |
| § 1 | 序 | 62 |
| § 2 | ダイヤ ディック表示法による表現 | 63 |
| § 3 | 積分核による表現 | 64 |
| § 4 | 両表現から導かれる計算機構 | 67 |
| § 5 | 多項式近似 | 69 |
| § 6 | 最適制御への応用と計算例 | 71 |
| § 7 | 検 討 | 73 |
| | References | 77 |
| 第6章 | Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) | 79 |
| § 1 | 序 | 79 |
| § 2 | 有限次元空間における SUMT | 79 |
| § 3 | 函数空間へ拡張された SUMT | 82 |

| | |
|----------------------------------|-----|
| References | 85 |
| Nomenclature for Part I | 87 |
| 第 II 篇 プロセス最適化問題の解析と最適化計算 | 91 |
| 第1章 序 章 | 92 |
| § 1 第 II 篇の意図と第 I 篇との関係 | 92 |
| § 2 多段十字流抽出プロセスの最適化問題に関する研究について | 92 |
| § 3 多段及び管型反応器プロセスの最適化に関する研究について | 93 |
| 第2章 多段十字流抽出プロセスの最適化問題の数学的, 図形的性質 | 95 |
| § 1 系のモデルと最適化問題 | 95 |
| § 2 状態変数についての最適化 | 98 |
| § 3 連続系への拡張 | 99 |
| § 4 多段系の目的函数式の連続系のものへの類似 | 102 |
| § 5 目的函数の性質の図形的解釈 | 103 |
| § 6 最適化問題の一般化 | 105 |
| § 7 類似問題 | 105 |
| § 8 局所最適点の必要条件 | 110 |
| § 9 最適な分割点の分布と函数重(α)の形状 | 110 |
| § 10 局所最適点の充分条件 | 113 |
| References | 117 |

| | | |
|-----|--|-----|
| 第3章 | 多段十字流抽出プロセスの最適化問題における多峰性の解析 | 118 |
| §1 | 多峰性解析の一般的意義 | 118 |
| §2 | 抽出プロセスの最適化問題と平衡曲線 | 119 |
| §3 | 原料入口濃度変化に対する多峰性 | 120 |
| §4 | 段数の変化に対する多峰性 | 128 |
| | References | 137 |
| 第4章 | 多段十字流抽出プロセスの最適化問題における感度解析 | 138 |
| §1 | 序 | 138 |
| §2 | 感度解析計算 | 138 |
| §3 | 検 討 | 143 |
| | References | 148 |
| 第5章 | 多段十字流抽出プロセスの最適化計算法 | 149 |
| §1 | 序 | 149 |
| §2 | 収束の速さの比較 | 149 |
| §3 | Davidon-Fletcher-Powell 法の数値誤差に由来する不安定性の発生例 | 154 |
| §4 | 最大化問題のためのDavidon-Fletcher-Powell 法 | 155 |
| §5 | 不等号束縛条件の処理 | 157 |
| §6 | 平衡曲線型と不等号束縛条件の処理法統論 | 160 |
| | References | 163 |
| 第6章 | 温度に上限下限のある多段反応槽列系のNewton 法と Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)による最適化 | 164 |
| §1 | 序 | 164 |
| §2 | 反応プロセスモデルと最適化問題 | 164 |
| §3 | 数値解法と計算結果の検討 | 165 |

| | |
|--|-----|
| References | 175 |
| 第7章 温度に上限下限のある管型反応器系のDavidon-Fletcher-Powell法とSequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)による最適化 | 176 |
| §1 序 | 176 |
| §2 反応プロセスモデルと最適化問題 | 176 |
| §3 計算結果とその解釈 | 178 |
| References | 184 |
| Nomenclature for Part II | 185 |
| 謝 辞 | 190 |

総

論

化学プロセスの最適化，最適制御に関する研究が活発に行われるようになってから，すでに久しい。その間，最適化，最適制御に関する理論，数値計算法，計算機等の急速な発達進歩のあったことにも助けられて，極めて多くの成果が挙げられてきた。初期においては，化学プロセスの最適制御について，最適化理論や計算法の適用の定式化，およびその理論，計算法の有効性を示すことに重点がおかれ，化学プロセスの制御問題とその解の意味を追及することには重点を置いていないものが数多く見受けられた。その反動もあるであろうが，現在では，実在のプロセスにおける問題を解くこと，あるいは，プロセスの最適制御問題の性質，解の意味を論ずるという見方が重視される傾向があると見受けられる。

いふならば，初期に多かったのは，最適化，最適制御の理論，解法を道具とした，道具志向型研究であり，その後，主流となっているのは，目的志向型研究であるといえよう。この歴史の流れには，或る程度必然的なものがあったといえるであろう。プロセスの最適化問題の性質を知る上では，はじめに起った道具志向型の研究の多くは，その内容そのものは直接にはさして重要でないものが多いであろう。しかしながら，目的志向型研究の発生を促し，遂行の助けになったという効果はあったであろう。すなわち，理論，計算法の有効性を示すことを意図してその成果が挙げているならば，そのような意味での意義を認めるべきである。

化学プロセス最適化制御設計の研究発展の歴史は，これから，困難ではあるが，みのり豊かな発展をみせてゆくのではないかと思われる。以下に，発展の過程において予想される問題点について述べ，本論文における最適化計算に対する考え方を明らかにして行く。

現実的に求められている最適化問題を解決しようとすれば，現実のプロセスのモデルを建設するという作業が行われると共に，ひとつの装置についての最適化，あるいは，化学工学でいう，単位操作レベルでのそれから，それらを含む工程全体，プロセス全体の最適化が取扱われなければならないことになる。このことは，必然的に解くべき問題の変数を増加せしめ，目的函数の形も複雑化し，問題を規定する方程式も増加する。即ち，対象とするプロセスの複雑化，大規模化が起ってくることによって，その最適化問題を解くことが種々の意味で困難になって来る。即ち，問題の定式化の面倒さ，計算手順の複雑化，計算プログラムの長大化，計算所要時間，所要計算機メモリの増加などのことが障害となるようになる。

(ここで、プロセスの複雑さ、大規模さについての分類、尺度は重要な問題であるが、本論文では深くは立ち入らない。)

対象とするプロセス全体が大きくなっても制御設計をする上で全体としては影響の無視できる要素は切捨ててゆくことが、上の問題の深刻化を緩和しよう。しかし、「何の影響が無視できるか」はそれ自身が、最適制御設計に用いるためのモデル作り、というひとつの研究課題である。

プログラム作成は、すぐれたコンパイル言語の出現によって、機械語時代に比べれば、極めて楽になった。また、ライブラリルーチンの整備は、プログラム作成を大きく助ける。しかし、いかにしても、対象としたプロセスの問題固有のプログラムは、計算機ユーザー、プロセス解析者が個々の場合について作りなければならず、知的に訓練された人力を要する。よって、なるべくなら問題固有のプログラムは多く要求されないことが望ましい。

計算機記憶量、所要計算時間の増大による困難は、計算機の発達普及によっても或る程度吸収しうる。又、計算論としても、多重レベル法、分解原理などによって、計算機運用上の問題点が或る程度取り除かれよう。

プログラム作成、所要計算機記憶量、所要計算時間についての困難性は、適切な計算法を選ぶこと、あるいはそのようなものを開発することによってもなされる。即ち、プロセスの最適化、制御の問題を解くに当って、求める解を得るのに要する計算量が少ないこと、対象プロセスの問題に固有のプログラムを多く要求しないことなどの条件をみたす計算法を探り出し、計算原理の有効な適用法を見出し、更には、望ましい計算法を作り出すことによって、上の困難性が軽減される。

このように、プロセス最適化、制御の問題を目的志向型の立場から研究するとしても、有効な、あるいは適切な計算法を選び作ることには必要となる。

すぐれた計算法を作り出すということは、数値計算法の学問分野の問題とも考えられるが、すぐれているということは、最終的には実際に役立つかどうかの問題であり、適切な計算法であるかということは、解くべき問題が規定されなければ定まらない面がある。化学プロセスの制御を含め、広範な分野から起きた数値計算法への現実の要請が数値計算法の研究の方向を探る上で重要なものとなる。

化学プロセスの制御への適用の場合に限って言われることではないが、数値計算法の特性を知る上で必要なことは、実際にその方法を試してみよということである。

数値計算法の理論においては、ある制限された条件をみたす問題に対して、丸め誤差、近似誤差などが存在しないとした理想的計算が行われることを想定して議論が行われることが多い。これは、明晰で見通しのよい理論を構成する為に必要なことであるが、現実には、要求された条件がみたされていない問題

に適用しなければまらないこともあり、また、上記のような理想的計算が行われることは少ないとみてよい。理想化された理論と実際との間隙の所在と広さを知る意味で、計算方法は「一度は試してみる」必要がある。もし、理論通りにならず何等かの困難が生じたなら、そこに数値計算法の次の問題があるのである。

その意味でプロセス最適化においても、適当な計算法と使用方法とを知る為には、多くの計算経験の蓄積が必要である。その蓄積の中から求める知識も得られるし、数値計算法の分野への情報のフィードバックもまされる。

このような点を考慮して、本論文では、化学プロセスの最適化制御の為に計算法について検討し、また、計算法の改良、拡張、変法の提出をし、また、それらの方法をプロセス最適化問題に適用して、プロセスと最適化問題の性質を調べると共に、計算経験の蓄積と検討を行う。

本論文で採上げた計算法は、グラジエント法のひとつである Davidon-Fletcher-Powell 法 (DFP 法) とそれに関連のあるものである。対象としたプロセスは主に抽出プロセスであり、他に多段及び管型反応プロセスである。これらプロセスについて、その最適化問題の数学的性質の追究、目的函数の多峰性の系統的な探索と検討、感度解析の他に計算法の適用法についての考察が行われる。

論文は第Ⅰ篇と第Ⅱ篇からなる。第Ⅰ篇は主として計算法について論じ、第Ⅱ篇はプロセスに関係することを扱っている。

即ち、第Ⅰ篇では、先ず、第Ⅰ章において有限次元空間におけるグラジエント法の概論を行う。これは、本論文で主として考察する DFP 法の最適化手法の中での位置付けを行うためである。

第Ⅱ章では、DFP 法を含めた共軛方向法で特に重要となる、グラジエント法における 1 次元探索問題のより合理的な解法として、著者によって考案された方法を与える。

第Ⅲ章では、DFP 法について詳しく解説し、併せて、この方法と同じく共軛方向法に属する共軛勾配法についても解説する。また、DFP 法の 1 次元探索の近似誤差に由来する不安定性を除くための著者による修正法を述べる。

第Ⅳ章においては、著者によって DFP 法の拡張として導かれた感度解析法について述べる。この感度解析法は、目的函数の独立変数の変動に対する函数値の変化を知るものである。この方法は、プロセスの最適化問題の解析に適した計算法を開発したという点、適用される最適化問題について固有のプログラムを殆んど必要としない——感度解析の為だけに限って言えば、何等必要としない——という点に特徴があり、第Ⅰ篇中の主要なテーマのひとつである。

第Ⅴ章においては、Horwitz & Sarachik と Tokumaru, Adachi & Goto によって独立になされた DFP 法の函数空間への拡張について述べ、これと同じ

拡張の積分核を用いた全く違った形の著者による表現を与える。それに次いでこの表現に従って導かれた計算法が著者によって与えられている。この方法は函数空間における拡張法の困難性であるところの探索反復と共に所要記憶が増加することを免がれている方法である。

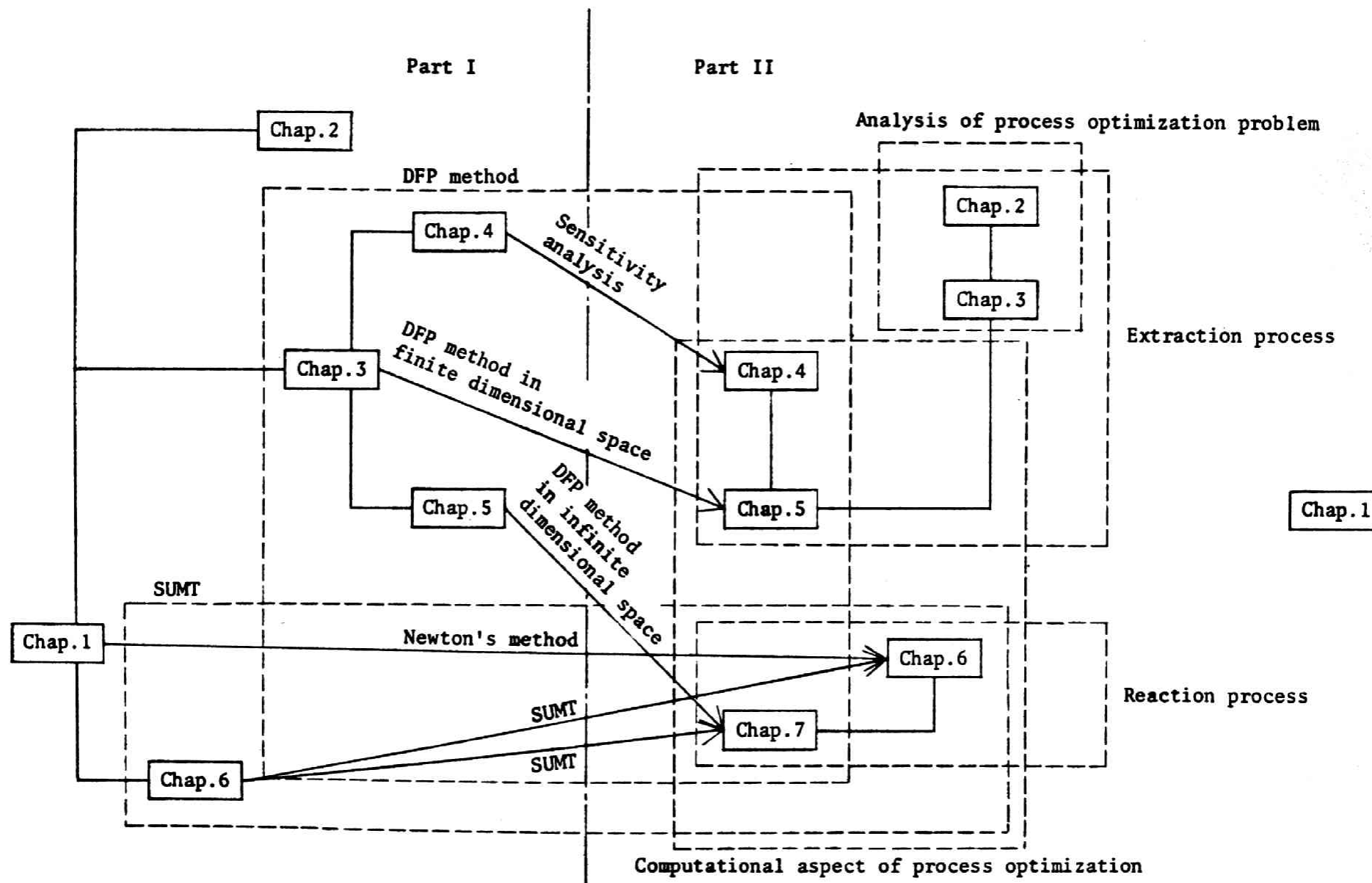
さらに、いずれの計算法をとる場合でも、全体の計算所要記憶を減らす多項式近似法も与えた。本章は第4章とならぶ第I篇の主要部分である。

第6章において、束縛条件つき最大最小化問題の処理方法のひとつである Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) について略述する。Davidon-Fletcher-Powell 法が束縛条件を含まない問題の解法であるため、實際上よく現われる束縛条件付き問題を処理するためには、何等かの手段を講じなければならない。その為には、SUMT が有効と考えられるので、これについて述べ、第II篇において束縛条件付き最適化問題を扱う準備をするのである。

第II篇では、抽出プロセスと反応プロセスの最適化問題を扱っている。それぞれのプロセスの問題について論じられていることの相互の関係、あるいは第I篇とどのような関連があるかを、第II篇第I章において概観している。

第II篇に含まれる研究の立場について述べる。それは、プロセス最適化問題を解析すること(第2章、第3章)と、解析のための最適化などに関連した計算法の適用方法とその有効性の検討をすること(第4章、第5章、第6章、第7章)とに大別される。前者は本論文におけるプロセス最適化問題研究の最終的段階を示したものであり、目的志向型研究に属する。後者は目的志向型研究の為の手段の提供と試験とをなしているものである。後者を道具志向型研究に含ませることもできようが、最適化手法が適用できるようにプロセス最適化問題を定式化するという作業に重点があるわけではない。化学プロセスなどの實際上現われる最適化問題の持つ計算上の困難性を克服ないしは回避する方法を探ることを目的としたものである。

本論文の各章の内容の関連、共通点などについての図式を Fig. 0-1 に掲げる。



第 I 篇

Davidon-Fletcher-Powell法を中心としたグラジエント法の拡張

第1章 グラジエント法概説

§1 序

第I篇においては、プロセス最適化のため、計算方法の理論を発展させること、いくつかの計算法を比較すること、計算手順を開発すること、計算方法の有効性を検討することなどが行われる。

最適化手法として、本論文で取扱われるものは、グラジエント法 (gradient method) と呼ばれるものであり、さらに細く分類すれば共軛方向法のひとつである Davidon-Fletcher-Powell 法 (DFP 法) と呼ばれるべきものである。

DFP 法のグラジエント法の中での位置づけを明確にするため、本章では、グラジエント法についての概観を与える。なお、DFP 法については、第3章において、さらに詳細に論じられる。

グラジエント法全般にわたって、そこに含まれる種々の方法について解説すること、あるいはグラジエント法の発達の歴史を述べることは、すでに他に文献のあることでもあり、^{1~8} 本章では意図しない。

§2 山登り法とグラジエント法

ある n 変数の 1 階連続微分可能な函数

$$f(x) \quad (1-1)$$

の最小値と最小値を与える点 (最小点) とを求める最小化問題を考える。 $f(x)$ の最小点は少なくとも 1 箇は存在するものとする。

この問題の解の満たすべき必要条件は、

$$\nabla f(x) = 0 \quad (1-2)$$

として与えられる。この非線型連立方程式が簡単に解ける場合は稀というべきで、むしろ (1-2) を含めるところの非線型連立方程式、

$$f_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (1-3)$$

の解を求めるために、この方程式を解く問題を、函数

$$\sum_{j=1}^n f_j^2(x) \quad (1-4)$$

の最小化問題に帰着させることが行われるほどである。⁹⁾

(1-1)の函数の最小化問題を解くためには、グラジエント法を含む山登り法(本来は最大化問題に対する言葉であるが、最小化問題に対してもこの語が用いられることが多い。)なる数値的方法が知られている。

山登り法には種々の方法があるが、共通の考え方は、 $f(x)$ なる目的函数値が、ある試行点 x^i における $f(x)$ より小となる点 x^{i+1} を何等かの方法に依って探し出し、この手順を繰返し行うことである。

山登り法、又はそれに含まれるグラジエント法の分類は、主に、目的函数値が x^i におけるよりも小になる点 x^{i+1} を探し出す手続に着目して行われる。そしてこの手続は、次の i), ii) に分たれる。

i) 試行点 x^i から x^{i+1} への移動方向 d^i

$$d^i = \alpha(x^{i+1} - x^i), \quad \alpha > 0 \quad (1-5)$$

を求めること。

ii) d^i 方向での試行点間の距離

$$\|x^{i+1} - x^i\| \quad (1-6)$$

を定めること。

数値計算法として、工夫が凝らされ、興味深いものは、主に i) についてである。i) をなす為には、目的函数 $f(x)$ の導函数(少なくとも1階偏導函数)を用いるものを、一括してグラジエント法と呼ぶ。

ii) についても多くの方法がある。数値計算法上問題が生じるのは、1次元探索によって、 d^i 方向における函数 $f(x)$ の最小点を求める方法による場合である。n次元空間の探索問題が1次元のそれにおきかえられたので、問題は理論上は簡単化されたように思われる。しかし、この手続を数値的に実行する際に、 $f(x)$ の値を計算することを多数回行うことを要するならば、その為にかかる計算時間は大きくなり、グラジエント法の数値計算法としての有効性が損われる。

また、ii) のための方法と i) のための方法とを任意に組合せて用いることができないことは注意すべきである。

§3 探索方向の決定法

この節では、前節 i) の為の方法、即ち、グラジエント法における試行点の移動方向の決定法について述べる。多くの場合、この移動方向について、前節 ii) の移動距離決定の為の 1 次元探索が行われるので、この移動方向は探索方向とも言われるべきものである。

最も直観的に理解しやすく、計算上も簡単で古くから知られているグラジエント法に、最急降下法 (steepest descent method) (最大化問題においては、最急上昇法 (steepest ascent method)) がある。これは、 x^i を試行点として、次の試行点 x^{i+1} を求めるとき、

$$d^i = -\nabla f(x^i) \quad (1-7)$$

とするものである。この方法の名の通り、点 x^i で最も函数値の減少する勾配が急であるのは、(1-7) のベクトル d^i の方向である。

$$\varphi(a; x^i, z) = f(x^i + az), \quad a \geq 0 \quad (1-8)$$

とおいて、 x^i における $f(x)$ の z 方向の勾配を考えると、それは下に定義される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z} &= \frac{1}{\|z\|} \left. \frac{\partial \varphi(a; x^i, z)}{\partial a} \right|_{a=0} \\ &= \frac{1}{\|z\|} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x^i + hz) - f(x^i)}{h} \end{aligned} \quad (1-9)$$

$f(x^i + hz)$ を x^i のまわりの $f(x)$ の Taylor 級数展開によって表わせば、上式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z} &= \frac{1}{\|z\|} \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{j=1}^n \frac{h z_j \frac{\partial f(x^i + h\theta z)}{\partial x_j}}{h} \\ &= \frac{z^T \nabla f(x^i)}{\|z\|}, \quad (0 \leq \theta \leq 1) \end{aligned} \quad (1-10)$$

$\|z\|$ が一定値 C であるとき、(1-10) を最小ならしめる為には、 z を次のようにとればよい。

$$z = -\alpha \nabla f(x^i), \quad \alpha > 0 \quad (1-11)$$

ただし、 $\alpha \|\nabla f(x^i)\| = C$

(1-11)より, (1-7)が与える d^i が, 函数 $f(x)$ の x^i における減少勾配が最も急な方向であることが分る。

ただし, ここでは, 函数値の変化勾配を考えるときのノルムは次の様に定義されているとしている。

$$\|z\| = \sqrt{z_1^2 + z_2^2 + \cdots + z_n^2} \quad (1-12)$$

最急降下というのは, (1-12)なるノルムの定義を前提としてのことである。

上の最急降下法に対して, Newton法(Newton-Raphson法)と呼ばれる方法による d^i の決定法がある。この方法は, 1変数代数方程式

$$h(x) = 0 \quad (1-13)$$

を解く為の同名の方法の n 変数への拡張であり, 連立非線型代数方程式の解法そのものであるとも考えられる。

まず, (1-1)の函数の最小点を求める問題を, (1-2)を満足する点を求める問題におきかえる。ただしここでは, (1-1)の函数が2階連続微分可能であるとする。

点 x^i で $\nabla f(x)$ をTaylor級数展開して, 3次以上の項を打切れば, 次式が得られる。

$$\begin{cases} \frac{\partial f(x^i)}{\partial x_1} + \sum_{j=1}^n z_j \frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_1 \partial x_j} = \frac{\partial f(x^{i+1})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x^i)}{\partial x_n} + \sum_{j=1}^n z_j \frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_n \partial x_j} = \frac{\partial f(x^{i+1})}{\partial x_n} \end{cases} \quad (1-14)$$

ただし, $x^{i+1} = x^i + z$ としている。この式は, 次の形にも書くことができる。

$$\nabla f(x^i) + \left(\frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_j \partial x_k} \right) z = \nabla f(x^{i+1}) \quad (1-15)$$

(1-2)を解こうとしているのであるから, 上式の右辺をゼロとするような z を求めることになる。このことより,

$$x^{i+1} = x^i - \left(\frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_j \partial x_k} \right)^{-1} \nabla f(x^i) \quad (1-16)$$

ただし, (1-15)の係数行列($f(x)$ の x^i におけるHessian行列, 即ち, $\nabla f(x)$ の x^i におけるJacobian行列)は正則とする。

$f(x)$ が2次形式のとき、数値的誤差を無視すれば、或る試行点 x^i に対し、 x^{i+1} は(1-16)により、(1-2)を満足するように定められる。一般に $f(x)$ が2次形式でない場合、(1-16)を反復的に適用する。函数 $f(x)$ に依っては、(1-15)の係数行列が正定値とならないことがある。このとき、目的函数 $f(x)$ の関係

$$f(x^{i+1}) < f(x^i) \quad (1-17)$$

は保証されない。また、一般の非線型目的函数については、

$$d^i = - \left(\frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_j \partial x_k} \right)^{-1} \nabla f(x^i) \quad (1-18)$$

$$x^{i+1} = x^i + \alpha d^i, \quad \alpha > 0 \quad (1-19)$$

において、前節ii)の $\|x^{i+1} - x^i\|$ の適当な決定、即ち、 α の調節をすることなく、(1-16)に従って画一的に $\alpha = 1$ とするならば、(1-15)の係数行列が正定値であっても、(1-17)は保証されない。

一般にグラジエント法の或る探索方向決定法によって、試行点 x^{i+1} を定めるとき、(1-17)が成立つような $\alpha > 0$ を常に適当に選ぶならば、探索方向決定法は安定が保証されている、という。探索方向の決定法の安定が保証されるための必要充分条件は次式で与えられる。

$$d^{iT} \nabla f(x^i) < 0 \quad (1-20)$$

探索方向の決定法の安定が保証されていても、(1-19)によって x^{i+1} を定めるための、 α の選び方の規定によつては、(1-17)が満されないことがある。上のように $\alpha = 1$ と規定しておく、係数行列が正定値であつて(1-20)が満されていても、(1-17)がなりたたなくなることがあるのである。

化学プロセスの最適化問題を含めて、実用上現れる複雑な形の目的函数については、1階偏導函数を導くのも面倒なものが少なからずあり、2階偏導函数を必要とすることは、本法の重大な欠点である。

最急降下法は、 x^i において目的函数 $f(x)$ を接平面近似して x^{i+1} を推定しようとするものであり、Newton法は、 x^i において2次曲面近似してこれを行う。最急降下法は簡単であるが、接平面による全く局所的近似をしているため、目的函数 $f(x)$ の曲面形によつては、解に充分に近い試行点を得るまでに極端に多くの探索試行の繰返しを要する。一方、Newton法は、 $f(x)$ のHessian行列が正定値のとき、解に近い試行点がいったん得られれば、その後は急速に解に収束する。しかし、Newton法は上述の欠点を持っている。

ある意味において、上の両方法の中間的性質を持つものに、共軛方向法(conjugate direction method)として一括される方法がある。この方法に

については次節でやや詳しく述べるが、着想されたのも、前兩者の方法より新しく、それらがそれぞれに持つ欠点を補う有効な方法として認められつつある。

§4 共軛方向法概説

Hestenes & Stiefel によって、連立1次方程式を解くための共軛勾配法 (conjugate gradient method) が提出されたときに¹⁰、この方法をも含む共軛方向法 (conjugate direction method) が理論的に明確に規定された。この規定をみたす方法は一意的に定まるものでなく、種々の方法が考えられるが、現在有力視され、かなり普及しているものに、上述共軛勾配法とそれに基づく Fletcher-Reeves 法 (FR 法) が¹¹、更に強力なものとして、DFP 法 (Variable Metric Method)^{12,13} がある。

Hestenes & Stiefel は連立1次方程式を2次形式の最小化問題に帰着させて、これを解く方法として共軛勾配法を提出した。この方法を一般の非線型関数の最小化問題を解く為に拡張したのが Fletcher & Reeves¹¹ である。一方、Davidon は Variable Metric Method と名づける方法を提出し、¹² Fletcher & Powell¹³ はこの方法を洗練して広く用いられるようにした。この DFP 法は本論文において主たる最適化計算法として用いられ、第Ⅱ篇に述べる様におおむね好成績をあげている。

共軛方向法が数値計算法として評価されるのは、前節に述べた最急降下法の欠点である目的関数の曲面形によって極端に解への到達がおそくなることを避け、なおかつ目的関数の1階偏導関数を用いるのみであるので、Hessian 行列を要するという Newton 法の欠点も持たない、という点にある。

共軛方向法の基本的な考え方は次のようである。

2次形式の目的関数 $q(x)$ (A : 正値対称)

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c \quad (1-21)$$

の最小点を求めるのに

$$d^{jT} d^k = 0, \quad j = 1, 2, \dots, k-1 \quad (1-22)$$

なる探索方向を各探索繰返し回に用い、

$$\alpha^k = \frac{r^{kT} d^k}{d^{kT} A d^k} \quad (1-23)$$

$$r^k = -b - A x^k \quad (1-24)$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k \quad (1-25)$$

により逐次計算を繰返すものである。

(1-21)の2次形式函数について、 x でのグラジエントベクトル $g(x)$ は

$$\begin{aligned} g(x) &= \nabla q(x) \\ &= Ax + b \end{aligned} \quad (1-26)$$

である。共軛勾配法においては、 d^i を定める際に、この $g(x^i)$ が計算に用いられる。(1-23), (1-24), (1-25)によって x^{i+1} を定めると x^{i+1} は次の α についての函数

$$q(x^i + \alpha d^i) \quad (1-27)$$

の最小点となる。

(1-26), (1-27)の性質を以って、共軛方向法を一般の非線型目的函数 $f(x)$ の最小化問題に拡張することを考えよう。

まず、1階偏導函数が必要なきには、(1-26)右辺によることはできないので、個々の問題の目的函数について、グラジエントベクトル $\nabla f(x)$ の式を導く。 α^k に相当するものも(1-23)によっては定義されないので、(1-27)に相当する

$$f(x^i + \alpha d^i), \quad \alpha > 0 \quad (1-28)$$

を最小とする α を求めてこれにあてる。このために α^k の値を実際に求める手続が1次元探索である。

共軛方向法には多くの種類のものがあるが、それらについては省略する。本論文中最適化手法として中心的役割を果たすDFP法と共軛勾配法、FR法については、第3章において詳述する。

§5 1次元探索

前節にみた通り、共軛方向法を実行するには(1-28)を最小とする α を求めなければならない。目的函数が2次形式(1-21)でない限り、この α^k の決定は殆んどの場合、数値計算による試行の繰返しによって行うことになる。

最急降下法においては、この(1-28)を最小とする α の決定という作業が不可欠というわけではない。

$$f(x^{i+1}) < f(x^i) \quad (1-29)$$

なる様に

$$x^{i+1} = x^i + \alpha d^i, \quad \alpha > 0 \quad (1-30)$$

の α を定めればよく、その様な α は $d^i \neq 0$ なる限り必ず存在する。

Newton法においては、目的函数が2次形式であれば、 $\alpha = 1$ として(1-30)により、 x^{i+1} が定められる。 $f(x)$ が2次形式でなくとも、 $\alpha = 1$ は適当な α の推定に役立つ。そして最急降下法のとときと同じく、(1-29)がなりたつように α をえらべばよい。

共軛方向法ばかりでなく、最急降下法、Newton法においても、(1-28)を最小にする α 、 α_{min} を(1-30)に用いることが行われることがある。

本論文においては、共軛方向法が最適化計算法として主に用いられることから、以下、1次元探索といえ、今後は特に断らない限り α_{min} を求めることとする。

ここで、 α_{min} を数値的に求める方法における問題について略述する。

α_{min} を含むであろう α の区間を細分してすべての分割点の α について先に(1-28)を計算してから、函数の最小値を与える α を求めて α_{min} とする方法は拙劣である。

探索すべき α の有限区間が分っているとき、黄金分割法、Fibonacci分割法により α_{min} を求める方法は次章で述べる。また、著者によるこれら方法の改良法¹⁴も次章で述べる。

α の探索すべき区間が有限でないとき、または有限であっても区間長が知りえないときについては、ある初期の値をとり、順次これを増加又は減少させていってそれぞれの α の値について、 $f(x^i + \alpha d^i)$ を求め、その値から α_{min} の存在する区間を見出し、必要ならば他の方法でさらに α_{min} の存在する区間を縮めて α_{min} の近似値を求める。この具体的方法としては、 $-f(x^i + \alpha d^i)$ の単峰性(unimodality)を仮定して、 α の値を順次2倍または $1/2$ 倍していつて α_{min} の存在する区間を見出す方法がよく用いられ、バイナリー法(binary method)と呼ばれる。

α_{min} の存在するある区間が見出された後、更に α_{min} を精密に求めるためには、

- i) その区間を更に細分割する。
- ii) その段階で $f(x^i + \alpha d^i)$ の最小値を与えた α と、その α の $1/2$ 倍、2倍の値の α とについての3点を通る α を変数とする放物線を考え、その軸を与える α を以て α_{min} の近似値とする。(放物線内挿法)
- iii) 各々について、 $f(x^i + \alpha d^i)$ と共に $\frac{d}{d\alpha} f(x^i + \alpha d^i)$ も計算して、隣り

ある α についての, $\frac{d}{d\alpha}$ が同じの値が負になる α の間に α_{\min} が存在するとして, その α の2点で3次曲線をあてはめ, α_{\min} を推定する。(3次曲線内挿法) などがある。

いずれにしても, 1次元探索の試行の繰返しの過程のうちで, 函数 $f(x)$ などの計算のための全時間が過大にならないようにしなければならない。また, 1次元探索の計算機プログラムは繁雑になりがちであることも, 困難の一因である。

§6 束縛条件の処理

前節までに述べてきた最小化問題では, すべて, $f(x)$ の変数 x が変化する範囲を制限する束縛条件は存在しないものとしてきた。しかし, 実際上において現れる最適化問題では束縛条件を含む下のような問題がきわめて多い。

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{函数 } f(x) \end{array} \right. \quad (1-31)$$

を最小ならしめる x を次の束縛条件を満足する範囲内で求めよ。

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, p \quad (1-32)$$

$$g_i(x) = 0, \quad i = p+1, \dots, r+q \quad (1-33)$$

問題によって, $p=0$ または $q=0$ であるものがある。

この様な問題では前述のグラジエント法は直接に使えず, 計算上きわめて困難な問題を引起す。探索方向決定法として, 共軛方向法のような巧妙かつ複雑な方法を考慮に入れず, 最急降下法のような単純なもののみを対象とするならば, グラジエント法における興味が束縛条件処理にのみ集まることは, むしろ当然といえよう。そのため, グラジエント法の議論として, もっぱら束縛条件の処理法が扱われることがある。³

グラジエント法によって, (1-31) ~ (1-33) で表わされる問題を解く方法は2つに大別されよう。

第1はRosen¹⁵のGradient Projection MethodやZoutendijk¹⁶のMethods of Feasible Directionsのように, 探索中に束縛条件として実際に利いている条件式について

$$g_i(x) = 0, \quad 1 \leq i \leq p+q \quad (1-34)$$

なるいくつかの面上で探索をしていこうとするものである。

第2のものは, Fiacco & McCormick¹⁷の Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) に代表されるペナルティ 関数法である。

本論文では第Ⅱ篇で最適化手法のプロセスにおける問題への適用をする際, SUMTによっているので, 第Ⅰ篇第6章において, SUMTの概要を述べておく。

形式的に(1-32)の束縛条件の課せられている問題でも, (1-32)をみたす範囲内の x について, (1-31)を最小にする点が決して(1-32)の等号をみたさないことが理論的に証明され得る場合がある。この例は第Ⅱ篇に挙げるが, そのような場合, 束縛条件の処理は非常に容易になる。

§7 目的関数の形状

グラジエント法はその種類によって, 目的関数の形状について何等かの制限を課せられるものがある。

いかなる種類のグラジエント法についても, 局所的最小点が少なくとも1ヶ存在すること, 目的関数に下限があることが要求される。化学プロセス最適化の様に最小点に物理的な意味があるものについては, この要求を満たさない目的関数はあまりないと考えてよく, この要求を満たさない問題は計算以前の最適化問題の設定に検討すべき点があると考えられる。たとえば, 化学反応の転化率を最大とする温度分布を決める問題において不可逆反応を考察すれば, 当然反応温度が無限大になるが, これは化学反応に対する洞察から知られることであり, 計算上の困難を生ぜしめることはない。あるいは, この反応系で触媒や反応装置材料の耐えうる温度の限界が最適化問題の束縛条件となって最適温度分布が決ってしまい, 無限大の解を与えないこととなる。

グラジエント法であるので, 目的関数の1階連続微分可能性は当然要求される。

次に本論文で主要な役割を果たす共軛方向法の要求する目的関数の性質として, 2階連続微分可能性がある。この性質を要求する点では, Newton法も同じである。Newton法では計算上Hessian行列を必要とするのであったが, 共軛方向法では, FR法, DFP法のように計算上は1階偏導函数のみを用いながら, 最小点近傍において目的関数を2次形式近似しえなければならぬという

ことから、2階連続微分可能性が要求される。化学プロセスの最適化問題では、この要求は満たされているものが多いであろう。束縛条件の処理をペナルティ関数法によって行うとき、採用したペナルティ関数法によっては原目的関数が持っていた2階連続微分可能性が目的関数に加えられたペナルティ項により失われることがあることは注意を要する。前節でふれたSUMTは、ペナルティ項によって、2階連続微分可能性が失われることはなく、この点でもすぐれた方法である。

最小化問題について、目的関数が凸であることを要求する種類のグラジエント法もある。Newton法がその好例であって、凸でなければ、Hessian行列が正定値にならず、安定の保証がえられない。あるいは、SUMTは第6章に述べる様に、目的関数の凸性を要求する。プロセスの最適化問題についてみれば、第Ⅱ篇に掲げる多段反応槽列の最適温度分布を求める問題、あるいは第Ⅱ篇第2章～第5章の抽出の問題の目的関数は最小化問題としてみたとき凸でない。このように、現実の化学プロセスの中では単純な方に属する系の目的関数がすでに凸でないことからみても、化学プロセスの最適化問題については目的関数が凸でないものはかなり多いと考えておくべきであり、またたとえ凸であっても、その証明は容易ではない。しかしながら、第Ⅱ篇第6章においてみるように、凸でなくとも正しい解に到達することは充分ありうる。

目的関数が局所的最大点を複数個持つことは多峰性(multimodality)といい、唯一個持つことを単峰性(unimodality)という。以下、多峰性、単峰性なる語を最小化問題にも用いる。大域的最大(小)点を求めようとするとき、多峰性の有無は決定的な問題であり、単峰であることが事前に知られない限り、探索問題は面倒なものとなる。プロセスの最適化問題では当然大域的な最小点が最も重要なものであって、少なくとも、いくつかの局所的最小点のうちの1ヶが見出されれば事足りるという問題は稀であろう。第Ⅱ篇の第2章から第5章までで対象としている抽出の最適化問題は凸でないばかりでなく、多峰である。

多峰な目的関数の処理の仕方は、グラジエント法をもって数値的に行うには、多くの探索出発点を無作為的にとって、全部の局所最大点を発見しようとするしか方法がないのが現状であるといつてよい。この方法は計算時間を多く要する上に、局所的最小点を取りこぼしなく網羅したという理論的な証明を与え得ない。最小化問題によっては数値的に解く前に、目的関数の性質をよく調べて、パラメーターの組によって、単峰となっていることを証明したり、あるいは、局所最小点の数、位置をある程度予想することもできることがある。このような方法は第Ⅱ篇第2章、第3章にその例がみられる。あるいは、第Ⅱ篇第3章で述べるように、パラメーター変動に対する局所最小点の数、位置の変化を系統的に調べることも有効である。即ち、これら変化の傾向が知られていれ

ば、あるパラメーターの組に対し局所最小点の数、位置の推測が付き、探索出発点を無作為的に取るのではなく、推測した最小点の存在する付近に取ることによって、少ない計算量で求めようとしている最小点を決定することができる。更に、あるパラメーターの組に対して、局所最小点が全部得られていると考えてよいか、まだ得られていない最小点が残っているかを推測する根拠を与える。

化学プロセスの最適化のような実際問題の最適化のための計算にグラジエント法を適用するとき、上述の様に目的函数の凸性、単峰性の保証のないものが多いという困難があるが、このことは、強い条件の下で理論づけられた方法が実用に供されるには、単純に適用すればよいというものでなく、計算上の工夫を多く要することを意味する。

実際に現れる問題を解かなければならないという要請がある以上、問題に要求される条件のすべてが満たされているといえない場合でも、グラジエント法の適用を放棄すべきではなく、論理的な保証、明晰性を犠牲にしても適用してみるべきであろう。なぜならば、グラジエント法によれば、たとえ最適点に到達しえないとしても、安定な方法でさえあれば、探索繰返し毎に、目的函数値がより小（最大化問題であれば、大）となる点が求められる、あるいは、解への収束の理論的保証がなくとも、真の解に到達することはしばしばありうる。又、グラジエント法が実際の計算では試行錯誤的に用いられることが多いので、収束の保証の欠如を試行錯誤により補うこともできるなどの理由による。むしろ、理論的に明快に扱えない最適化問題をいかに数値的に解くかが、プロセス最適化における独特の問題のひとつであるといえる。

§8 探索の終止規準

グラジエント法によって最小点を探索するとき、ある出発点から出発して探索を繰返し、最小点の充分近くに到達したとき、探索を終止しなければならない。必要以上に精密な解を計算することは、計算時間の浪費である。ところが、最小点の充分近くに到達しているか否かを計算機によって判別するための探索の終止規準の決定はきわめて困難な問題を引起す。

最小点 x^* 、その点での函数値 f^* として、実用的には、探索で得られた点 x について、問題の要請によって次のいずれかの条件が満たされれば探索を終止してもよい。

$$|f^* - f(x)| \leq \varepsilon_1 \quad (1-35)$$

$$\|x^* - x\| \leq \varepsilon_2 \quad (1-36)$$

誤差最小化問題のように、 $f^*=0$ であることが知られている問題もあるが、殆どの実用上の最小化問題では、 x^* は当然として f^* も知りえない。よって、問題の実用上の要求から $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ の値が知り得ていても、(1-35), (1-36)は直接には全く終止規準の役をなさない。

通常用いられる終止規準としては、 i 回、 $i+1$ 回の探索点 x^i, x^{i+1} について次のような式のいわれかが用いられる。

$$\|x^i - x^{i+1}\| \leq \varepsilon_3 \quad (1-37)$$

$$|f(x^i) - f(x^{i+1})| \leq \varepsilon_4 \quad (1-38)$$

$$|\{f(x^i) - f(x^{i+1})\} / f(x^{i+1})| \leq \varepsilon_5 \quad (1-39)$$

$$\|\nabla f(x^{i+1})\| \leq \varepsilon_6 \quad (1-40)$$

目的函数を1階連続微分可能とし、安定性が保証されていれば、(1-37)～(1-40)は x^* の充分微小な近傍の点については満足される。しかしながら、問題の要請から ε_1 又は ε_2 が知りえたとしても、その $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ について(1-35), (1-36)を満足するような $\varepsilon_3 \sim \varepsilon_6$ を求めることは、不可能といわないまでも、大変面倒である。又、前節に述べたような複雑な目的函数曲面形を持つ問題については、 x^* の充分小な近傍に x^i, x^{i+1} がなくとも、小なる $\varepsilon_3 \sim \varepsilon_6$ について、これらの条件式が満足されてしまうことがありうる。このように考えると(1-37)～(1-40)の探索終止規準は一見合理的であるが、このままでは実用的規準とはいえない。

終止規準の設定はグラジエント法の解決不可能ともみられるデレンマであるが、現状では上の $\varepsilon_3 \sim \varepsilon_6$ の適当な値自身を試行錯誤で決定する方法が多くとられているようである。

共軛方向法を一般の非線型目的函数に適用したとき、最小点 x^* に近い試行点において2次形式目的函数に適用したときにみられる速い収束が期待できることは、第3章に述べる。実際、第II篇第5章に述べるように十進浮動小数点演算において目的函数値 $f(x^i), f(x^{i+1})$ が9桁の有効数字で末尾に1程度の差が残るまで近づくように計算をしても、さして探索繰返し回数が大にならないことがみられる。よって、共軛方向法を採用して $f(x^i), f(x^{i+1})$ の差が小になって計算機の有効桁数からして探索続行が不可能となることを終止規準にとっても、さして計算時間を無駄にせず、しかも不当に早く計算を中断するおそれのないことがありうる。このことも共軛方向法のひとつの利点とみてよいであろう。

しかし、この規準によって終止させたとして、到達点が最小点あるいは停留点である保証はない。

結局のところ、(1-35)、(1-36)又は(1-37)へ(1-40)によって終止判定をすることは、便宜的なものでしかない。そこで、何等かの規準によりいったん探索を終止させたその後、得られた点が局所最小点であるか否かを調べるが行われる。その為に、第4章において触れる様に、得られた点のまわりの走査をすること、あるいは異った探索出発点から同じ点が最小点として得られるかを計算してみるが行われる。後者の方法は多峰性の探索も兼ねることと、附加的プログラムを要さない点で、前者より優れている。到達した点が局所最小点であるか否かを調べる為に、第4章の著者による感度解析法¹⁸は極めて有効なものである。

探索終止規準の設定を上述してきたことと全く異った発想で行うこともできる。即ち、上の終止規準は計算をバッチ処理する後のものであって計算終止に至るまで計算の制御はあらかじめ定めた計算プログラムによって行われる。

これに対し、いわゆる計算機との会話をするMAC (Machine Aided Computation または Multiple Access Computer) システムの利用による探索終止が考えられる。即ち、計算者が計算経過を監視しつつ計算を行い、あるいは計算途中に計算者が計算の制御を行い、試行錯誤を繰返した後、更に問題に対する計算者の洞察もまじえて場合に応じて計算者自身が終止させることが考えられる。MAC システムの利用は決して万能ではないが、ターンアラウンドタイムの短縮と無駄な計算続行をしないことの利点がある上、計算の制御に万全を期するための計算機プログラムが複雑繁瑣になることを避ける附加的な利点もある。

探索の終止規準の設定の困難なことと関連して、次のことを考慮しておくべきである。安定の保証されたグラジエント法においては、探索繰返し回毎に目的函数値のより小さな点が見出される。よって、終止規準が不適当であって局所最小点、場合によっては停留点にも達してはいないとしても、探索出発点と比較すれば、より小さな函数値を与える点を得ていることになる。実用上ではそのような点を知りえただけでも充分利益のある場合があると考えられる。

References

- 1 Spang III, H.A.: A review of minimization techniques for nonlinear functions, SIAM Review, Vol.4, 1962, pp.343-365.
- 2 Hadley, G.: Nonlinear and dynamic programming, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts, 1964, pp. 296-349.
- 3 Wilde, D.J.: Optimum seeking methods, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1964, xii+202p.
- 4 Box, M.J.: A comparison of several current optimization methods, and the use of transformations in constrained problems, Computer Journal, Vol.9, 1966, pp.67-77.
- 5 佐山, 大井: 非線型計画法とその応用例, 制御工学, Vol.11, 1967, pp. 565-573.
- 6 佐山, 大井: こう配法のプロセス最適化への応用, 計測と制御, Vol.10, 1970, pp.725-739.
- 7 志水: 制約条件のないシステムの最適化手法, 計測と制御, Vol.9, 1970, pp.449-459.
- 8 志水: システムの制約条件付最適化手法, 計測と制御, Vol.9, 1970, pp. 519-530.
- 9 Ralston, A.: A first course in numerical analysis, McGraw-Hill Book Company, New York, 1965, pp.348-350.
- 10 Hestenes, M.R., and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol.49, 1952, pp.409-436.
- 11 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.

- 12 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 13 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 14 高松, 佐山, 大井: グラジエント法における1次元探索法に関する一考察, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.596-604.
- 15 Rosen, J.B.: The gradient projection method for nonlinear programming, Part.I. Linear constraints, Journal Soc. Indust. Appl. Math., Vol.8, 1960, pp.181-217.
- 16 Zoutendijk, G.: Methods of feasible directions A study in linear and non-linear programming, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1960, 123p.
- 17 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, A primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 18 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: An extension of the Davidon-Fletcher-Powell method to sensitivity analysis, (未発表).

第2章 グラジエント法における1次元探索法

§1 序

多変数の関数の最大点(最小点)を決定するために、グラジエント法はきわめて実用的で有用な方法である。しかしながら、一般に変数の数が増加するにつれて、この方法では収束速度が遅くなり、また解を得るために必要な計算時間も増加する。そこで、グラジエント法の収束速度を速くし、また計算時間を減少させるための種々の方法が研究されている。その一つは、共軛方向法を代表とする解に到達するまでの繰返し回数を減らすような、収束の速いグラジエント法を用いることである。^{1~3} 実際、そのような方法によって収束も速くなり、計算時間を大幅に減らすことができる。

しかし、グラジエント法による計算時間の大部分は、1次元探索のために費やされる例が多いので、解を得るまでに必要な1次元探索の繰返し回数を減少させるだけでなく、各回の1次元探索に要する計算時間あるいは関数値評価回数を減らすことも重要である。

探索区間長が与えられているとき、合理的な1次元探索法として、ミニマックス論による黄金分割法、Fibonacci分割法がある。これらの方法は、区間上のいかなる点が最大点であるとしても、最小の誤差長を与えるものである。しかし、グラジエント法では、繰返しが進むにつれて、1次元探索における最大点は、探索出発点のごく近くにあることが多くなる。

また、グラジエント法における1次元探索問題では、通常の1次元探索問題と異なり、探索出発点に対応した区間端点の関数値が既知である。

本章では、この性質を利用して、ミニマックス論による通常の1次元探索法を一部修正し、グラジエント法における1次元探索をより有効に行う著者による方法⁴を示す。この修正法は、いかなる場合にも通常法より不利になることはない。また、この修正法を二つの問題に適用して、通常の1次元探索法より有効である計算例を与える。なお、本章では便宜上、最大化問題を考える。

§2 1次元探索問題

グラジエント法における1次元探索問題は、前章§5にもふれた様に次のように分類できる。

- A) 探索すべき区間長が有限で、その値が与えられているもの。
- B) 探索すべき区間長が有限であるが、その値が与えられていないもの。
- C) 探索すべき区間長が有限でないもの。

これらの分類は、与えられた問題の不等号束縛条件の性質；または探索方向によって生じるものである。

ここでは、分類 A) の問題のみを取扱う。この問題に対しては、次のようないくつかの探索方法がある。いずれも区間上での函数の単峰性を仮定する。

A.1) 探索出発点では、函数の勾配とその値自身も求められているので、その点から順次離れた点の函数値を求め、最大点をはさむ区間を得たのち、決められた精度まで区間を短縮する。

A.2) 探索区間が有限かつ既知なことに着目し、ミニマックス法探索方法を用いる。即ち、ある探索計画法について最も不利な場合の誤差区間長が最小となるような探索法（最適探索法）である。一般の 1 次元探索問題では、探索に用いる総試行回数 N がはじめに与えられているときには、通常の Fibonacci 分割探索法が、また別の探索終止規準（たとえば最大値に対する相対的な精度）が与えられているときには、黄金分割法が、それぞれミニマックス論的に最適な方法である。

A.3) 区間上のいくつかの点における函数値あるいは勾配を求めて、2 次あるいは 3 次の曲線を近似することによって、最大点の位置を推定する。これについても前章 §5 でふれている。

本章では、グラジエント法における 1 次元探索に対しては、A.2) の通常の Fibonacci 分割法、黄金分割法が必ずしも最適でなく、更に改良する余地のあることを示す。

5.6

まず、次に通常の Fibonacci 分割法と黄金分割法について述べる。

1 次元探索問題：

点 a, b にはさまれた探索区間 ab が与えられたとする。一般性を失わずに、 $a=0, b=1, |a-b|=1$ とできる。この区間上の点 x での函数値を $f(x)$ で表わす。 $(0 \leq x \leq 1)$ また、 $f(x)$ はこの区間上で単峰であるとする。ここで考察の対象とするのは、最大点を含む微小区間を有限回の試行（函数値計算）で求める問題である。探索を始める前に試行回数の決められている場合と、そうでない場合とについて、それぞれミニマックス論による次の I と II に示すような最適探索計画法がある。ここで最適探索法とは、最適点が含まれている区間長を最小にするのではなく、誤差区間長を最小にするものである。誤差区間長とは、試行の結果見出されたもっとも大きな函数値を与えた点と、そのときに残された区間の端点との距離のうち、大きな方をいう。グラジエント法、特に共軛方向法においては、各探索で求められ最大点が次の探索の出発点になるので、最大点をはさむ区間よりも、最大点を決定すべきであり、したがっ

て、誤差区間長を最小としなければならない。

I. 通常の黄金分割法

各段階においては、1回の試行(函数値計算)を行うものとし、 n 段階(n 未定)よりなる探索計画は次のように与えられ、その概略を Fig. 2-1 に示す。

1) どの段階でも、区間 $x^* x^{**}$ を対象とする。($x^* < x^{**}$)

2) 第1段階では、 $a = x^*$, $b = x^{**}$ で

$$\begin{aligned} x^1 &= x^* + \frac{1}{\tau^2} (x^{**} - x^*) \\ &= a + \frac{1}{\tau^2} \end{aligned} \quad (2-1)$$

$$\begin{aligned} x^2 &= x^* + \frac{1}{\tau} (x^{**} - x^*) \\ &= a + \frac{1}{\tau} \end{aligned} \quad (2-2)$$

のいずれかにおける f の値を求める。(第1試行)

3) 第 k 段階では、($1 < k$)、はじめに

$$x^1 = x^* + \frac{1}{\tau^2} (x^{**} - x^*) \quad (2-3)$$

$$x^2 = x^* + \frac{1}{\tau} (x^{**} - x^*) \quad (2-4)$$

のいずれかにおける f の値が求められている。

4) 第 k 段階では、 x^1, x^2 について、 f の値が求められていない点における f の値を計算する。

5) 第 $k+1$ 段階では、

$$f(x^1) \leq f(x^2) \quad (2-5)$$

であれば、 $x^1 x^{**}$ を対象とする。($x^1 \rightarrow x^*$)

$$f(x^1) > f(x^2) \quad (2-6)$$

であれば、 $x^2 x^{**}$ を対象とする。($x^2 \rightarrow x^*$)

6) $k+1 \rightarrow k$ として、3) へ戻る。ただし、終止の規準を満たしているならば、探索を打切る。

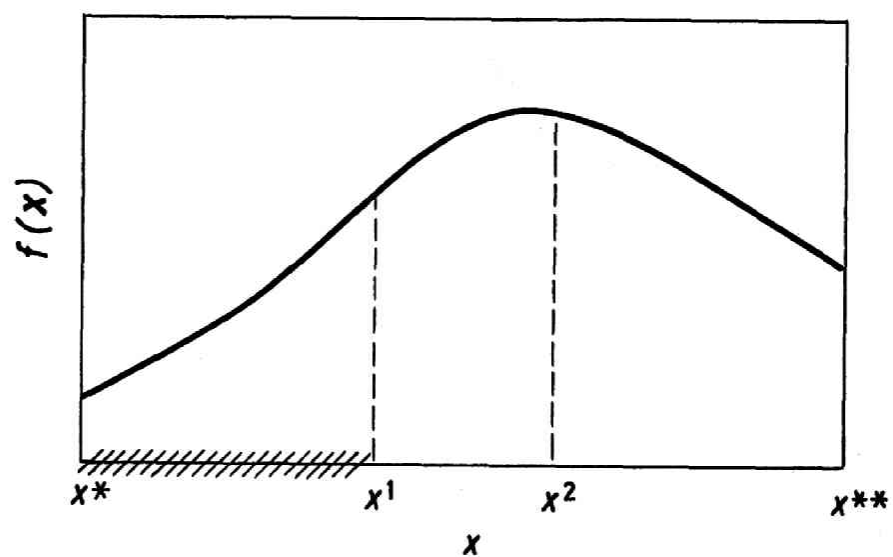
ここに、 τ は2次方程式

$$\tau^2 - \tau - 1 = 0 \quad (2-7)$$

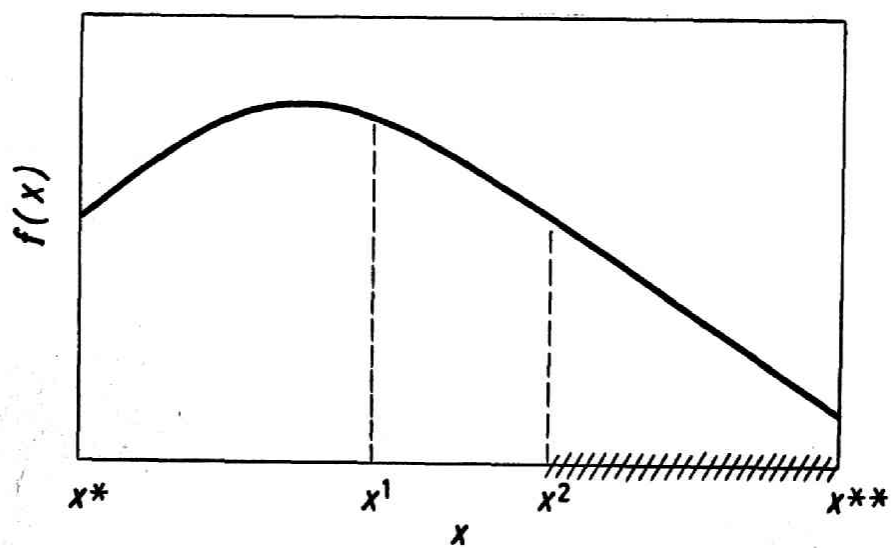
の正根であり、 $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ 。

II. 通常の Fibonacci 分割法

探索を開始する前に総試行回数を N と定める N 段探索計画法は、次のように



(a) $f(x^1) \leq f(x^2)$



(b) $f(x^1) > f(x^2)$

Fig. 2-1 One dimensional search by the ordinary method

与えられる。(これについても Fig. 2-1 参照)

1) どの段階でも, 区間 x^*x^{**} を対象とする。 ($x^* < x^{**}$)

2) 第1段階では, $a = x^*$, $b = x^{**}$ で

$$\begin{aligned} x^1 &= x^* + \frac{u_N}{u_{N+2}} (x^{**} - x^*) \\ &= a + \frac{u_N}{u_{N+2}} \end{aligned} \quad (2-8)$$

$$\begin{aligned} x^2 &= x^* + \frac{u_{N+1}}{u_{N+2}} (x^{**} - x^*) \\ &= a + \frac{u_{N+1}}{u_{N+2}} \end{aligned} \quad (2-9)$$

のいずれかにおける f の値を求める。

3) 第 k 段階では ($1 < k \leq N$), 初めに

$$x^1 = x^* + \frac{u_{N-k+2}}{u_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-10)$$

$$x^2 = x^* + \frac{u_{(N-k+2)+1}}{u_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-11)$$

のいずれかにおける f の値が求められている。

4) 第 k 段階では, x^1, x^2 について, f の値が求められていない点における, f の値を計算する。

5) $k = N$ ならば, 探索を打切る。 $k < N$ ならば, 第 $k+1$ 段階へ移る。このとき,

$$f(x^1) \leq f(x^2) \quad (2-12)$$

であれば, x^1x^{**} を対象とする。 ($x^1 \rightarrow x^*$)

$$f(x^1) > f(x^2) \quad (2-13)$$

であれば, x^*x^2 を対象とする。 ($x^2 \rightarrow x^{**}$)

いずれにしても, $k+1 \rightarrow k$ として 3) へ戻る。

ここに, u_j は次式より定まる Fibonacci 数である。

$$u_{j+2} = u_{j+1} + u_j, \quad u_1 = u_2 = 1 \quad (2-14)$$

§ 3 修正された 1 次元探索法

ある有限な区間上で単峰な函数の最大点を，誤差区間長が最小になるように探索するためには，§2で示したⅠまたはⅡの方法が最適である。しかし，これらの方法が最適であるのは，探索問題として，探索区間が既知で函数が単峰という条件のみが与えられている場合である。

グラジエント法による1次元探索問題には，更に次の条件がつけ加えられている。

- i) 探索区間の一端 (a) における函数値 $(f(a))$ が求められている。
- ii) 安定性が保証されているグラジエント法においては，端点 a は最大点であることはない。
- iii) 1次元探索を打ち切る前に， $f(a)$ より大きな函数値を与える点を求めなければならぬ。

条件 i) を考慮することにより，通常の1次元探索法を修正することが出来る。グラジエント法においては，繰返し計算が進むにつれて，探索の出発点となる区間端点 a が問題の解である可能領域内の最適点に近づく。したがって，各回の1次元探索においても，区間上の最大点が端点 a に近づく傾向がある。

最大点が端点の近くにある場合には，出発点のごく近くにはじめの試行点を取り，以下順次探索点を遠ざけてゆく方法，たとえば，第1章§5に述べたバイナリー法にくらべ，ミニマックス論的な立場に立って全区間を一樣に探索する方法は，同じ精度の解を得るためにはより多くの試行を必要とする。しかし逆に，最大点 a から大きく離れている場合には，出発点の近くから順次探索してゆく方法が，ミニマックス論に基づく方法よりも多くの試行を必要とする。そこで最も不利な場合の誤差区間長がミニマックス論に基づく方法より大きくならず，なおかつ最大点が a に近いときに，ミニマックス論に基づく方法よりも小さな誤差区間長を与えるような方法の開発が望ましい。

そのような，著者による修正法⁴を以下に与えるが，それらは函数値の分かっている端点 a に最大点が近づき，かつ $f(a) = f(p)$ ($p \neq a$) なる点 p もこれに近づくとき，非常に有効である。また，最大点が区間上のどこにある場合でも，通常法より不利になることはない。

次に，この修正法の原理を示す。ある試行点 x ($a \leq x \leq b$) について，Fig. 2-2に示すように

$$f(a) > f(x) \quad (2-15)$$

であるならば，単峰性の仮定により区間 $x \sim b$ には最大点は存在しない。通常法では二つの点， x^1, x^2 のいずれかを第1試行点としていたが，この修正法では，二つの点のうちで， a に近い点 x^1 を第1試行点とする。もし，

$$f(a) > f(x^1) \quad (2-16)$$

であるならば，Fig. 2-2に示すように，ただ1回の試行で探索区間の半分以上の $x^1 \sim b$ を探索区間から除くことができる。2回目以降も同じ手順を繰返すこと

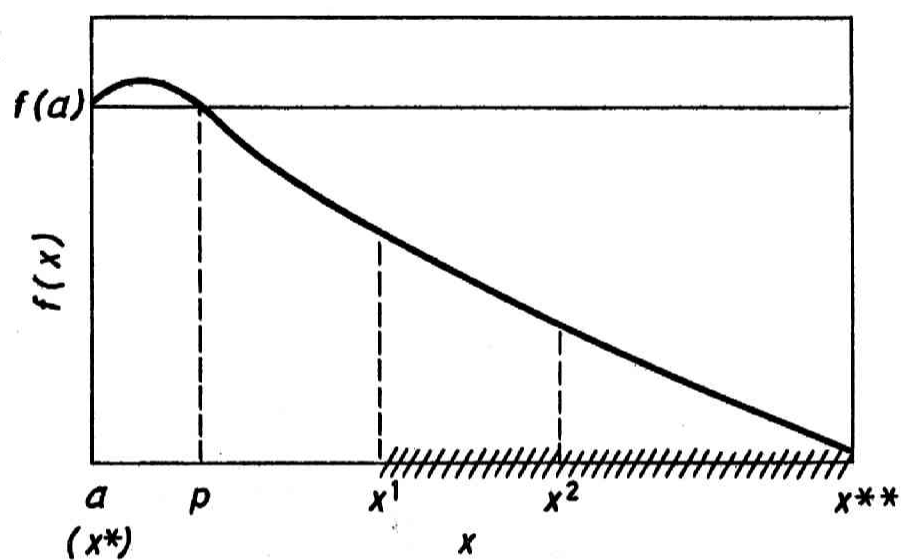


Fig. 2-2 One dimensional search by the modified method
 ($f(a) > f(x^1) > f(x^2)$)

により、通常の方法よりも有効な探索を行うことができる。

前節 I, II に対応する修正法を次に示す。

I. 修正された黄金分割法

$f(a)$ が既知の $m+n$ 段階 (m, n 未定) の探索計画法を次のように与え:

1) どの段階でも、区間 x^*x^{**} を対象とする。 ($x^* < x^{**}$)

2) 第 k 段階では、探索区間 x^*x^{**} において

$$x_k = x^* + \frac{1}{\tau^2} (x^{**} - x^*) \quad (2-17)$$

の函数値 $f(x_k)$ を求める。特に $k=1$ のときは、 $x^*=a, x^{**}=b, |a-b|=\epsilon$ である。

$$3) \quad f(x^*) \geq f(x_k) \quad (2-18)$$

であるならば、第 $k+1$ 段階では区間 x^*x_k を探索する。即ち、 $x_k \rightarrow x_{k+1} \rightarrow k$ として 2) へ戻る。

$$f(x^*) < f(x_k) \quad (2-19)$$

であるならば、 $k=m+1$ として、探索区間はそのまま、 $k+1 \rightarrow k$ としてへ移る。

4) 第 k 段階 ($k \geq m+2$) では、

$$x^1 = x^* + \frac{1}{\tau^2} (x^{**} - x^*) \quad (2-20)$$

または、

$$x^2 = x^* + \frac{1}{\tau} (x^{**} - x^*) \quad (2-21)$$

のいずれかにおける函数値が求められている。 ($k=m+2$ では x^1)

5) 第 k 段階では、 x^1, x^2 について、 f の値が求められていない点において、 f の値を計算する。

6) 第 $k+1$ 段階においては、

$$f(x^1) \geq f(x^2) \quad (2-22)$$

であれば、 x^*x^2 を探索区間とする。 ($x^2 \rightarrow x^{**}$)

$$f(x^1) < f(x^2) \quad (2-23)$$

であれば、 x^1x^{**} を探索区間とする。 ($x^1 \rightarrow x^*$) いずれにしても、 $k+1$ として、4) へ戻る。

7) 5) において、終止規準を満足するならば、探索を終止する。第 k 段階終止したとき、 $k=m+n$ ($n \geq 1$) とする。即ち、 m は修正法に特有な点の選定による試行の回数であり、 n は通常法と同様な探索点の選定による試行の回数である。

この方法によれば、探索終了時に

$$\text{残余区間長: } \left(\frac{1}{\tau^2}\right)^m \left(\frac{1}{\tau}\right)^{n-1} \quad (2-24)$$

$$\text{誤差区間長: } \left(\frac{1}{\tau^2}\right)^m \left(\frac{1}{\tau}\right)^n \quad (2-25)$$

一方、通常法によって同一の誤差長を得るために、 ℓ 回の試行を必要としたとすれば、

$$\left(\frac{1}{\tau}\right)^\ell = \left(\frac{1}{\tau}\right)^{2m+n} \quad (2-26)$$

よって、

$$\ell = 2m + n \quad (2-27)$$

n を一定として m が大きくなると、即ち、点 p が最大点とともに点 a にきわめて近い場合、通常法による必要試行回数 $2m+n$ は修正法の試行回数 $m+n$ の約2倍になる。又、 $m \geq 0$ であるので、いかなる場合にも、

$$m+n \leq 2m+n = \ell \quad (2-28)$$

したがって、修正法は決して通常法より不利になることはない。

即ち、この方法によれば、グラジエント法において1次元探索を行うときにしばしば生じる $|a-p|$ が小さな場合にも、探索が非常に有効に行えると同時に、いかなる場合にも通常の黄金分割法よりも悪い結果を与えることはない。

II 修正された Fibonacci 分割法 (その1)

$f(a)$ の値が既知で、総試行回数 N をあらかじめ定めた、 N 段の探索計画法を次のように与える。

1) どの段階でも、区間 x^*x^{**} を対象とする。

2) 第 k 段階において、

$$x_k = x^* + \frac{U_{N-k+1}}{U_{N-k+3}} (x^{**} - x^*) \quad (2-29)$$

の函数値 $f(x_k)$ を求める。 $k=1$ のときは、 $x^*=a$, $x^{**}=b$, $|a-b|=1$

3) $k=N$ のとき探索を打ち切る。 $k < N$ のとき、

$$f(x^*) \geq f(x_k) \quad (2-30)$$

であるならば、第 $k+1$ 段階では区間 x^*x_k を探索する。 $(x_k \rightarrow x^{**})$ $k+1=k$ として、2)へ戻る。

$$f(x^*) < f(x_k) \quad (2-31)$$

であるならば、探索区間をそのままとして、 $k=m+1$, $k+1 \rightarrow k$ として、4)へ進む。

4) 第 k 段階 ($m+2 \leq k \leq N$) では、

$$x^1 = x^* + \frac{U_{N-k+2}}{U_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-32)$$

$$x^2 = x^* + \frac{U_{(N-k+2)+1}}{U_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-33)$$

のいずれかの点における函数値が既知である。

5) 第 k 段階では, x^1, x^2 について, f の値が求められていない点における, f の値を計算する。

6) $k=N$ ならば, 探索を終止する。 $k < N$ のとき, 第 $k+1$ 段階においては,

$$f(x^1) \leq f(x^2) \quad (2-34)$$

であれば, $x^1 x^{**}$ を探索区間とする。 $(x^1 \rightarrow x^{**})$

$$f(x^1) > f(x^2) \quad (2-35)$$

であれば, $x^* x^2$ を探索区間とする。 $(x^2 \rightarrow x^{**})$ いずれにしても, $k+1 \rightarrow k$ として, 4)へ戻る。

この方法が通常の Fibonacci 法よりもすぐれていることを示す。

前述の点 p が,

$$a + \frac{U_{N-k+2} U_{N-k+1}}{U_{N+2} U_{N+1}} \leq p \leq a + \frac{U_{N-k+3} U_{N-k+2}}{U_{N+2} U_{N+1}} \quad (2-36)$$

($1 \leq k < N$)にあるとする。修正法によれば, 第 k 試行以下では, 探索区間を $a x_{k-1}$, 第1試行点を x_k とする $N-k+1$ 回の通常の Fibonacci 分割を行うことになる。 $(x_0 = b)$ によって, N 回の試行の終了したときの誤差区間長は,

$$\frac{U_{N-k+2}}{U_{N+2} U_{N+1}} \quad (2-37)$$

となり, 一方, 通常法によれば, 誤差区間長は,

$$\frac{1}{U_{N+2}} \quad (2-38)$$

である。この二つの誤差長については,

$$\frac{U_{N-k+2}}{U_{N+2} U_{N+1}} \leq \frac{1}{U_{N+2}} \quad (2-39)$$

であり, 等号が成り立つのは $k=1$ のときのみである。また,

$$p < a + \frac{U_2 U_1}{U_{N+2} U_{N+1}} \quad (2-40)$$

の場合, この修正法によれば最終誤差区間長は,

$$\frac{1}{U_{N+2} U_{N+1}} \quad (2-41)$$

であり通常法の $\frac{1}{U_{N+1}}$ 倍である。一方, 点 p が ab 上に存在しないとき, 修正法は通常法と同一の誤差区間長をもつ。

よって, 修正法による探索はいかなる場合にも通常法よりすぐれているか, または等しいことになる。

$$\frac{U_{N-k+2}}{U_{N+1}} \doteq \left(\frac{1}{\tau}\right)^{k-1} \quad (N \gg 1) \quad (2-42)$$

であるので、 $|a-p|$ が小さな場合、即ち、 k が大きな場合、修正法の誤差区間長は通常法よりも非常に小さくなる。この方法によれば、最も不利な場合の誤差区間長が通常法と同じであり、かつグラジエント法において多く生じる、 $|a-p|$ が小さな場合には、大きな k に対して誤差区間長が通常法の約 $(\frac{1}{\tau})^{k-1}$ 倍となることが示された。

Ⅲ 修正された Fibonacci 分割法 (その2)

通常 Fibonacci 分割法および本節Ⅱの方法では、場合によっては、 N 回の試行を行った後に、 $f(a)$ より大きな函数値を与える点を決定しえないで終止することがある。これに対し、次の方法を用いれば、この難点を除くことができる。

この方法では、次のような終止規準をとる。探索を開始する前に N を定め、 m として第 m 回、第 $m+1$ 回の試行点 x_m, x_{m+1} について、

$$f(x_m) \leq f(a), \quad f(x_{m+1}) > f(a) \quad (2-43)$$

となるものを取り、総計 $N+m$ 回の試行をしたのうち終止するものとする。

探索計画法を次のように与える。

1) どの段階でも、区間 $x^* x^{**}$ を対象とする。

2) 第 k 段階において、

$$x_k = x^* + \frac{U_N}{U_{N+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-44)$$

の函数値を求める。 $k=1$ のときは、 $x^*=a, x^{**}=b, |a-b|=1$ である。

3) 第 $k+1$ 段階では、

$$f(a) \geq f(x_k) \quad (2-45)$$

であれば、区間 $x^* x_k$ を探索する。 $(x_k \rightarrow x^{**})$ $k+1 \rightarrow k$ として、2) へ戻る。

$$f(a) < f(x_k) \quad (2-46)$$

であれば、探索区間をそのままにして、 $k=m+1, k+1 \rightarrow k$ として、4) へ進む。

4) 第 k 段階 ($m+N \geq k \geq m+2$) では、

$$x^1 = x^* + \frac{U_{N-k+2}}{U_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-47)$$

$$x^2 = x^* + \frac{U_{(N-k+2)+1}}{U_{(N-k+2)+2}} (x^{**} - x^*) \quad (2-48)$$

のいずれかにおける函数値が既知である。 $(k=m+2$ では $x^1)$

5) 第 k 段階では、 x^1, x^2 について、 f の値の求められていない点における、 f の値を計算する。

6) $k = N+m$ であれば、探索を打切る。 $k < N+m$ であれば、第 $k+1$ 段階では、

$$f(x^1) \leq f(x^2) \quad (2-49)$$

であるとき、 $x^1 x^{**}$ が探索区間となる。 $(x^1 \rightarrow x^{**})$

$$f(x^1) > f(x^2) \quad (2-50)$$

であるとき、 $x^2 x^{**}$ が探索区間となる。 $(x^2 \rightarrow x^{**})$ いずれも、 $k+1 \rightarrow k$ として、4)へ戻る。

ここで用いた終止規準によって、誤差区間長については、次の関係が成立つ

$$\frac{|a-p|}{u_{N+2}} \leq (\text{誤差区間長}) < \frac{|a-p|}{u_N} \quad (2-51)$$

即ち、 $f(x_m) < f(a)$ であるとき、誤差区間長が $|a-p|/u_N$ より小さくなることが保証される。なお、 $f(x^1) > f(a)$ のとき、総計 N 回の探索で終止する。このとき、 $a \leq p \leq b$ ならば、

$$(\text{誤差区間長}) < \frac{|a-p|}{u_N} \quad (2-52)$$

区間 ab 上に p が存在しないならば、

$$(\text{誤差区間長}) < \frac{|a-p|}{u_{N+2}} \quad (2-53)$$

である。

この方法の長所は、 $f(a)$ より大きな f の値を与える試行点を必ず見出してから終止すること、 $|a-p|$ に対する精度によって終止させることのできることである。更に注意すべきことは、同じ終止規準を本節Iの方法に適用したときは、

$$\frac{|a-p|}{\tau^N} \leq (\text{誤差区間長}) < \frac{|a-p|}{\tau^{N-2}} \quad (2-54)$$

であり、 $1/u_{N+2} < 1/\tau^N$ であるので、保証される誤差区間長は明らかにⅢの方が小さくなる。

また、

$$\frac{u_N}{u_{N+2}} < \frac{1}{\tau^2} \quad (2-55)$$

のとき、即ち、 N が偶数のとき、Ⅲの方法による m の値は、Ⅰの方法によるよりも小さくなるか、たかだか等しくなるかである。よって N が偶数のときは、必ずⅢの方法がⅠの方法よりすぐれている。 N が奇数のとき、

$$\frac{u_N}{u_{N+2}} > \frac{1}{\tau^2} \quad (2-56)$$

であるが、試行回数当りの誤差区間長の短縮率が大きくなる範囲、即ち、 m が

小さな範囲では、明らかにⅢの方法がⅠの方法よりもすぐれている。

本節Ⅰ, Ⅱ, Ⅲの修正法のそれぞれの特徴は次のようである。

Ⅰの方法は、終止規準が任意である。したがって、終止規準がⅡ, Ⅲの方法と異なる問題に対しては、Ⅰの方法が適している。

Ⅱの方法は、探索の総試行回数 N が定められている場合に、通常のFibonacci法に代って用いられるべきものである。しかし、実際上の問題としては、総試行回数 N をあらかじめ決めることは困難である。

Ⅲの方法は、誤差区間長が $|a-p|$ に対する相対的な精度を満たすことを終止規準とする場合に適している。この方法は、通常のFibonacci法とその修正法の一つである本節Ⅱの方法が a より大きな試行点を見出しえないうちに、終止する可能性をもつという欠点を除いたものである。

§4 数値計算例

§2および§3で述べたグラジエント法における1次元探索法の通常法と修正法とを比較するために、数値計算例を以下に示す。1次元探索法の有効性を知ることが目的であるので、比較的簡単な束縛条件が課せられ、変数の数が多い例題を取りあげる。

ここで考察する最適化問題は、次の(A)の形で与えられる。

(A) $f(x)$ を最大化する。

$C_{ix} \leq x_i \leq C_{ix}^*$ を束縛条件とする。 ($C_{ix} < C_{ix}^*$)

(この節では、 x の下付きの添字はベクトルの成分を表わす。)

(A)のように、変数の各成分に束縛条件として上限、下限の与えられている形の問題は、例2で示す多段槽列システムの最適化問題として、しばしばみられるものである。

不等号束縛問題(A)を最急上昇法で解くためには、Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)⁷, Methods of Feasible Directions⁸, また、その他種々のグラジエント法を用いることができる。

ここでは、(A)を次のような方法によって解くものとする。即ち、1次元探索を行うべき方向として、次の(B)により定まるベクトル S_{\max} を求めて、その方向で最大点を逐次的に決定していく。

(B) $\nabla f^T S$ を最大化する。
 $\begin{cases} x_j = C_j^* & \text{ならば } S_i \leq 0 \\ x_j = C_{j*} & \text{ならば } S_i \geq 0 \end{cases}$
 $S^T S \leq 1$ を束縛条件とする。

(B)の解 S_{\max} は(C)で与えられる。

$$(C) \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_j} > 0, & S_j \geq 0 \text{ または } \frac{\partial f}{\partial x_j} < 0, & S_j \leq 0 \\ \text{なる } j \text{ については,} \\ S_j = \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) / \left\{ \sum \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \\ \text{(} k \text{ はこの場合に属する } j \text{ のすべてについてとる。)} \\ \text{その他の場合の } j \text{ については,} \\ S_j = 0 \end{cases}$$

以下に示す1次元探索による最適化計算例では、いずれも、 x は2次元であるが、1次元探索の有効性を示すためには充分であると考えられ、同じ精度の解を求めるまでに必要とした試行回数を比較するために、言果を Table 2-1, Table 2-2 に示すような形式で要約した。これらの表に m , $l-n$ はそれぞれ探索区間を $|a-p|/(1/\epsilon^2)$ (p が a, b 上にないとき $|a-b|/(1/\epsilon^2)$) より小さくなるまで、短縮するために費された通常法の修正法による試行回数である。これは、結果的には無駄になったとみなすので試行の回数であり、終止規準には関係しない。

なお、いずれの例でも、次式を満たす試行点が得られたとき計算を終了ものとした。(Fig. 2-3)

$$f^1 - f^3 < \frac{f^1 - f(a)}{D} \quad (2-5)$$

f^1, f^3 はそのときまでに得られた最大値と最大値から数えて2番目の函数値。 D を大にとれば、より精密な1次元探索を行うことになるが、ここで $D=10$ を用いた。また、終止規準が満たされていて、更に得られた最大、 b の間に試行の行われていないときは、この2点の函数値のいずれが尤、を調べるために、更に点 b の函数値をも求めることとした。その結果として点 b における函数値がより大きいときには、この点を最大点として計算することにする。このような方法を使用することにより、探索繰返し回数させることができると思われる。

例1

Rosenbrock⁹により与えられている次の函数の最小点を求める問題を：

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \quad (2-5)$$

ただし、束縛条件は次の式で与えられるものとする。

$$0 \leq x_i \leq 2, \quad i = 1, 2 \quad (2-5)$$

この函数は、 $x_2 = x_1^2$ に沿った谷を持ち、最小点は明らかに $x_1 = 1.0$, $x_2 = 1.0$ である。探索の出発点を $x_1 = 1.8$, $x_2 = 0.2$ として、第3回までの探索

Table 2-1 Computational result of example 1

| Iteration number of search | Modified method | | | Ordinary method | | Minimum point | Minimum value |
|-------------------------------|-----------------|--------------------|-------|------------------------------------|-----|-------------------|---------------|
| | m | n | $m+n$ | $l-n$ | l | | |
| 1 | 0 | 5 | 5 | 0 | 5 | 0.687539 0.508791 | 0.227811 |
| 2 | 3 | 5 | 8 | 6 | 11 | 0.707105 0.495403 | 0.087897 |
| 3 | 5 | 6 | 11 | 10 | 16 | 0.705748 0.497150 | 0.086671 |
| Initial point | | 2.800000, 0.200000 | | Performance index at initial point | | 924.20 | |

Table 2-2 Computational result of example 2

| Iteration number of search | Modified method | | | Ordinary method | | Maximum point | Maximum value |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-------|------------------------------------|-----|--------------------------------------|------------------------|
| | m | n | $m+n$ | $l-n$ | l | | |
| 1 | 0 | 4 | 4 | 0 | 4 | 346.000 352.206 (346.292 354.510) | 0.543325 (0.528258) |
| 2 | 0 | 3 | 3 | 0 | 3 | 346.000 346.000 (346.000 347.465) | 0.559850 (0.558576) |
| 3 | 3 | 6 | 9 | 6 | 9 | 346.316 346.000 | 0.559878 |
| Initial point | | 348.000 368.000 | | Performance index at initial point | | 0.348269 | |

$m+n$: Total numbers of function evaluation required for the modified method
 m : k satisfying $f(x_{k+1}) > f(a)$ and $f(x_k) \leq f(a)$ for the modified method
 l : Total numbers of function evaluation required for the ordinary method

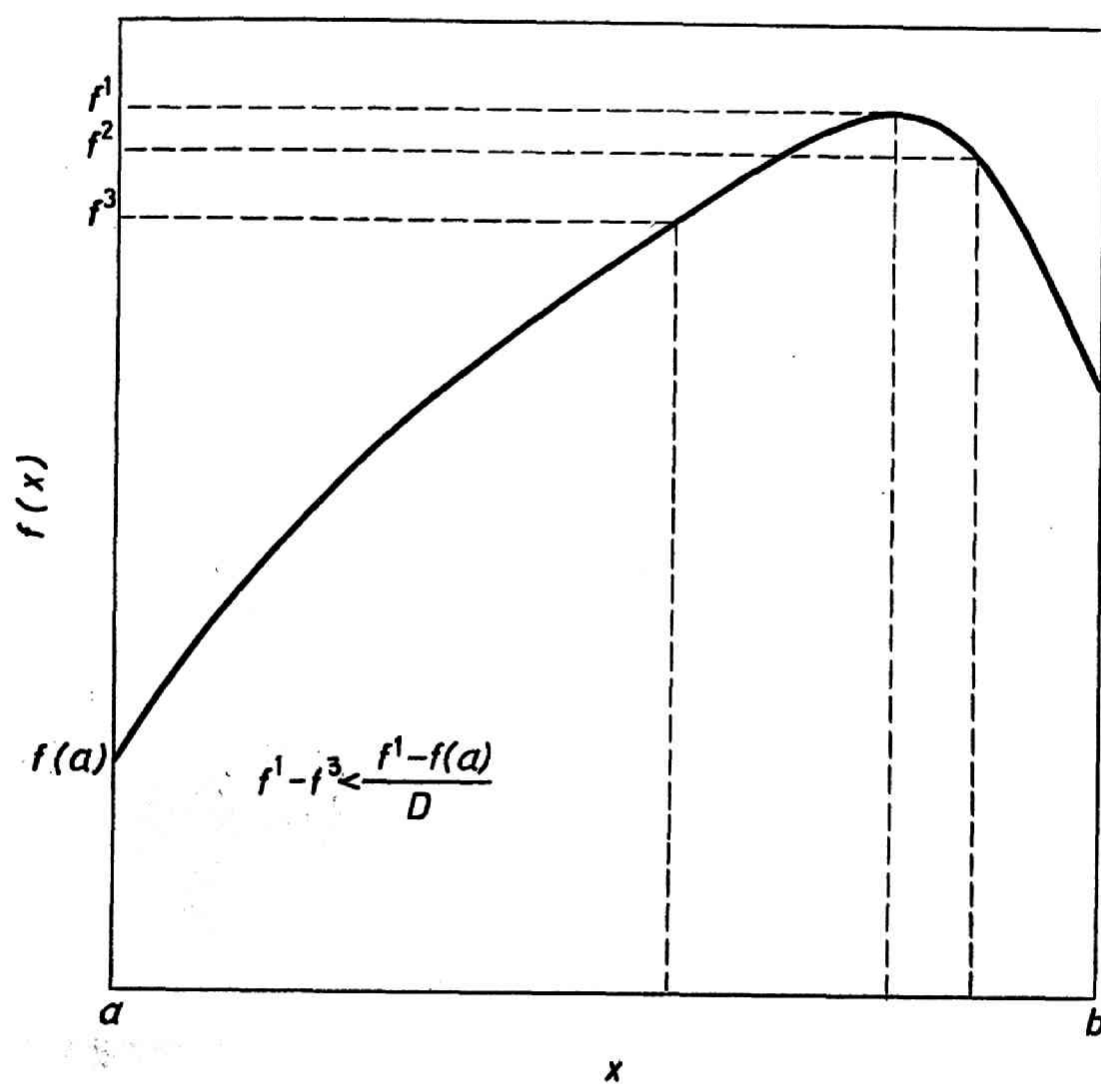


Fig. 2-3 Termination criterion of the one dimensional search

分割法を用いて行った計算結果を Table 2-1 に示す。Table 2-1 より明らか
なように、 $l-n=2m$ であり、無駄とみなすことのできる試行回数($m, l-n$)
が修正法では通常法の半分である。第4回以後の探索は函数の曲面の谷をジグ
ザグに進み、 m あるいは $l-n$ が更に大きな値になると考えられるので、最急
降下法により、この問題の最小点を求めるには、非常に多くの試行を必要とす
るが、ここでは1次元探索法の有効性を検討することを目的としているので、
第3回の繰返し計算までを行った。

例2

ここでは、工学上生ずる最適化問題として、化学プロセスの最適化問題を例
にとる。即ち、多段反応槽列において、各段の温度を最適に定めるものである
が、とりうる温度の範囲に制限のある問題である。Fig.2-4 から分かるように
、最適点が束縛境界上にある場合について計算を行った。

いま、反応 $A \rightarrow B \rightarrow C$ が同一の滞留時間 θ の N 段反応槽列で行われるものと
する。 $A \rightarrow B$ は2次反応、 $B \rightarrow C$ は1次反応である。 α_n, β_n を第 n 段におけ
る A, B の濃度とする。入口濃度を固定したときの、出口濃度で表わされる函
数

$$\beta_N + \rho \alpha_N \quad (2-60)$$

を最大にする各段の温度を求める。ここで ρ は B に対する A の相対価値である
各段の温度 x_n には、

$$C_* \leq x_n \leq C^*, \quad (C_* < C^*) \quad (2-61)$$

なる束縛条件が課せられているとする。

$A \rightarrow B, B \rightarrow C$ の反応速度定数 k_1, k_2 が Arrhenius 型

$$k_i = k_{oi} \exp\left(-\frac{E_i}{R x_n}\right), \quad i=1, 2 \quad (2-62)$$

であるとする。反応方程式は次式で表わされる。

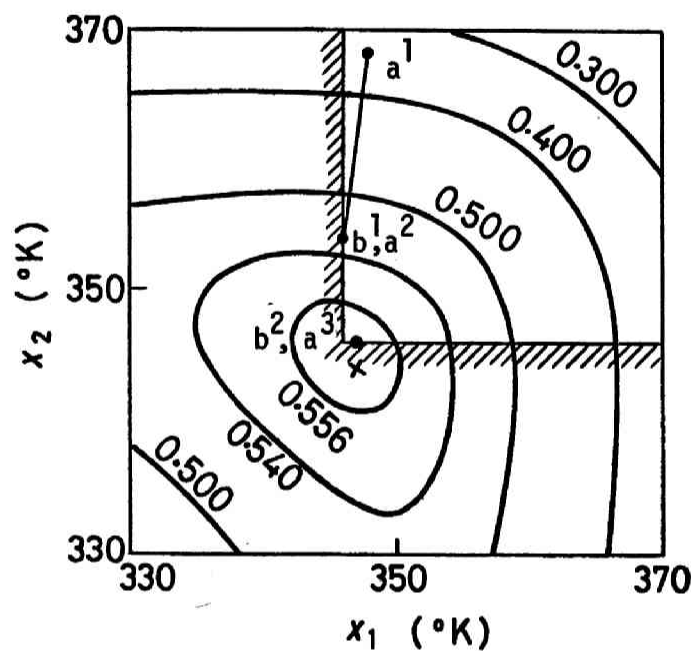
$$\begin{cases} \alpha_{n-1} - \alpha_n - \theta k_1 \alpha_n^2 = 0 \\ \beta_{n-1} - \beta_n + \theta k_1 \alpha_n^2 - \theta k_2 \beta_n = 0 \end{cases} \quad (2-63)$$

この問題は他の方法によっても解かれてゐる^{10,11}。計算に使用した数値は、

$$\begin{cases} k_{o1} = 5 \times 10^{10} \text{ litre/mole min} \\ k_{o2} = 3.33 \times 10^{17} / \text{min} \\ E_1 = 18 \text{ kcal}, & E_2 = 30 \text{ kcal} \\ \rho = 0.3, & N\theta = 6 \text{ min} \\ a_0 = 1.0 \text{ mole/litre}, & b_0 = 0.0 \text{ mole/litre} \\ C_* = 346^\circ \text{K}, & C^* = 370^\circ \text{K} \end{cases}$$

ここでは反応槽列を2段とする。

各繰返しの探索方向を(c)によって定め、1次元探索を黄金分割法で行ったと
きの試行回数を Table 2-2 に、また探索区間と最大点を Fig.2-4 に示す。全体



- a^i : starting point of one dimensional search in i -th iteration
- b^i : another end point of the interval in i -th iteration
- \cdot : maximum point subject to constraint
- x : maximum point subject to no constraint

Fig. 2-4 Intervals of one dimensional search and maximum point of example 2

の探索の出発点は, $x_1 = 348.00$, $x_2 = 368.00^\circ\text{K}$ とした。最大点は3回の1次元探索で求められた。最適点は $x_1 = 346.32$, $x_2 = 346.00^\circ\text{K}$ である。

第1回, 第2回の探索では, 端点bが最大点であるので, 二つの方法の間に差はない。またこのとき, それぞれ第4回, 第3回の試行で終止規準が満たされた。しかし, このときに得られた最大点 (Table 2-2の括弧内) と点bとの間では試行が行われていなかったのので, 更に点bの函数値を求め, その結果, 点bにおける函数値がより大きな値を与えたので, この点を区間上の最大点とした。第3回探索では, $l-n=6=2n$ であって無駄とみなしうる試行の回数が, 通常法では修正法の2倍になっている。

特にこの問題では, 1次元探索を行って S_{\max} の方向での最大点を求めたことにより, 大きなステップ幅で最適解に接近するので, 極めて少ない探索回数で解が求められている。

References

- 1 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 2 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.
- 3 高松, 佐山, 大井: 2次元探索グラジエント法による抽出プロセスの最適設計, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.313-321.
- 4 高松, 佐山, 大井: グラジエント法における1次元探索法に関する一考察, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.596-604.
- 5 Wilde, D.J.: Optimum seeking methods, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1964, pp.10-52.
- 6 Бородин, Н.Н., (簡井 訳): フィボナッチ数, 東京図書, 東京, 1966, 84p.
- 7 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, A primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 8 Zoutendijk, G.: Methods of feasible directions A study in linear and non-linear programming, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1960, 123p.
- 9 Rosenbrock, H.H.: An automatic method for finding the greatest or least value of a function, Computer Journal, Vol.3, 1960, pp.175-184.
- 10 Denn, M.M., and Aris, R.: Green's functions and optimal systems The gradient direction in decision space, I&EC Fundamentals, Vol.4, 1965, pp.213-222.
- 11 Sayama, H., and Oi, K.: Optimal design of chemical process by nonlinear programming technique, Memoirs of the School of

Engineering, Okayama University, Vol.2, 1967, pp.30-34.

第3章 Davidon-Fletcher-Powell 法を中心とした共軛方向法

§1 共軛方向法

第1章において概説したように、函数の最小化問題を解くためのグラジエント法のなかに、共軛方向法として一拾される方法があり、有効な方法として注目されている。この方法は、探索方向の決定法から見れば、最急降下法とNewton法との折衷法としての位置が与えられるべきものであるが、数値計算法としての有効性について評価すれば、最急降下法、Newton法の持つ欠陥を免れた、より優れた方法であるといえる。

本論文では、目的函数としては、一般の非線型函数を主として考えるのであるが、まず、2次形式目的函数(3-1)に対する共軛方向法について述べる。

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + C, \quad A: \text{正値対称} \quad (3-1)$$

共軛方向法は、(3-1)の形の n 変数の2次形式目的函数の最小点を求めるのに、丸め、近似などの数値計算上の誤差がなければ、 n 回の繰返し計算を必要とするのみである。

最急降下法においては、いわゆる細長く深い谷(最大化では屋根)、即ち、(3-1)の函数について楕円体

$$q(x) = k \quad (3-2)$$

の或る主軸が他の主軸に比し著しく長い場合、その長い主軸の近くにおいて、繰返し計算を非常に多く必要とする。繰返し計算実行回数が多ければ、それだけ計算量が大になり、実用上望ましくない。ある最適化問題について、最小点探索を何度も行う場合、1回の最小点探索をするのに要する計算量が大なることは、更に不都合なことである。その様な場合の例として、局所的最小点が大域的にも最小であるかを知る為に多くの探索出発点について計算する場合、目的函数のすべての局所最小点を求めようとする場合、目的函数のパラメータ値を変動させて、それに対する最小点の位置変化を追究する場合、などが挙げられる。

Newton法にあっては、(3-1)の目的函数について、共軛方向法よりも速く解に到達する。数値計算上の誤差がなければ、1回目で解を得る。しかし、(3-1)の目的函数については A^{-1} を計算しなければならない。Newton法の重大な欠点は一般の非線型函数にこれを適用したときに現れる。目的函数の2階

偏導関数の式を導き出して、その計算プログラムを作り、各探索繰返し回毎にこれを計算しなければならないことが、その欠点である。更に、Newton法では(3-1)以外の一般の非線型目的関数については、安定が保証されないことがある。

共軛方向法は、このような欠点から免れている。第1章に概説したが、共軛方向法は次のようなものである。

(3-1)を目的関数として最小点を求めるとする。任意の探索出発点をとって、各回の探索方向ベクトル d^i を(3-3)を満足するように定めていって、順次試行点 x^{i+1} を(3-4)～(3-6)により定めてゆく。

$$d^{kT} A d^j = 0, \quad 0 \leq j < k \quad (3-3)$$

$$x^{i+1} = x^i + \alpha^i d^i \quad (3-4)$$

$$\alpha^i = \frac{r^{iT} d^i}{d^{iT} A d^i} \quad (3-5)$$

$$r^i = -b - A x^i \quad (3-6)$$

2次形式目的関数に対しては、1次元探索を行うことなく $\alpha^i = \alpha^i_{\min}$ が計算される。

共軛方向法は、連立1次方程式を繰返し計算で解く急の方法として、Hestenes & Stiefel¹が次節の共軛勾配法を提出した際、共にその一般型として与えられたものである。

連立1次方程式で正値対称行列を係数行列とするもの

$$A x = -b \quad (3-7)$$

の解が h であるとする、ある x に対する残差 r は次式で表わされる。

$$r = A(h - x) \quad (3-8)$$

ここで次の函数を考える。

$$q_e(x) = \frac{1}{2}(x-h)^T A (x-h) \quad (3-9)$$

(3-9)の最小点と(3-7)の解が一致することは明らかである。(3-9)の拾弧を外すと

$$\begin{aligned} q_e(x) &= \frac{1}{2} x^T A x - h^T A x + \frac{1}{2} h^T A h \\ &= \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + \frac{1}{2} h^T A h \end{aligned} \quad (3-10)$$

(3-10)は(3-1)と同様の式であり、連立1次方程式の解を求めることは、(3-1)の最小点を求めることに帰着する。

連立1次方程式

$$Ax = -b \quad (3-11)$$

の係数行列が正則ではあるが正値対称でないときは、次式について共軛方向法が適用できる。

$$A^T Ax = -A^T b \quad (3-12)$$

(3-3)を満足するベクトル d^i は互いに A 共軛 (A -conjugate) であるといわれる。(3-3)をみたす d^i , $i=0, \dots, n-1$ は、 A が正定値なことより1次独立である。

(3-3) ~ (3-6) がなりたつとき、更に次の関係がなりたつことが数学的帰納法によって証明される。

$$d^{jT} r^k = 0, \quad j=0, \dots, n-1 \quad (3-13)$$

$$d^{kT} r^0 = d^{kT} r^1 = \dots = d^{kT} r^k \quad (3-14)$$

(3-14)より(3-5)は次の様におきかえられる。

$$\alpha^i = \frac{d^{iT} r^0}{d^{iT} A d^i} \quad (3-15)$$

d^i , $0 \leq i \leq n-1$ が1次独立であるので、任意のベクトルは、 d^i の1次結合で表わされる。ベクトル $h - x^0$ について

$$h - x^0 = C^0 d^0 + C^1 d^1 + \dots + C^{n-1} d^{n-1} \quad (3-16)$$

$$\begin{aligned} r^0 &= Ah - Ax^0 \\ &= C^0 A d^0 + C^1 A d^1 + \dots + C^{n-1} A d^{n-1} \end{aligned} \quad (3-17)$$

左から d^i を乗ずると

$$d^{iT} r^0 = C^i d^{iT} A d^i$$

$$C^i = \frac{d^{iT} r^0}{d^{iT} A d^i} \quad (3-18)$$

これから、 x^0 を出発点として (3-3) ~ (3-6) によって順次試行点を計算す

ると x^n は解に一致することが分る。このことは、(3-13)と $d^i, 0 \leq i \leq n-1$ が1次独立なことから、次式が導かれることによっても結論される。

$$r^n = 0 \quad (3-19)$$

(3-19)は n 回の試行後(3-7)の残差がゼロ、即ち、(3-10)の函数のグラジエントベクトルがゼロなることを示す。

探索方向 d^i の決定法は、(3-3)のみからは一意に定まらない。 d^i の決定方法によって、共軛方向法は更にいろいろな方法に分れる。

プロセス最適化を含めた実用上の最適化問題では、目的函数が2次形式でない場合が殆どといってよいであろう。このような一般の非線型函数の最小化問題の解法に上の2次形式に対する共軛方向法を拡張することを考える。

一般の非線型函数への拡張の理論的根拠、即ち、少ない探索繰返して最小点を見出すことを期待する根拠は次の通りである。

目的函数を少なくとも2階連続微分可能な函数 $f(x)$ とする。Taylor級数展開により、

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + \sum_{j=1}^n (x_j - x_{0j}) \frac{\partial f}{\partial x_j} \Big|_{x_0} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n (x_j - x_{0j})(x_k - x_{0k}) \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{x_0 + \theta \Delta x}, \\ x = & x_0 + \Delta x, \quad 0 \leq \theta \leq 1 \end{aligned} \quad (3-20)$$

$$\Delta x \rightarrow 0 \text{ のとき } \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{x_0 + \theta \Delta x} \rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{x_0} \quad (3-21)$$

であるので、 $f(x)$ の最小点 x^* では、

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad (3-22)$$

となることも考慮して、 $f(x)$ は x^* の微小近傍で2次形式近似ができる。

$$f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2} (x - x^*)^T f_{xx} (x - x^*) \quad (3-23)$$

ここに f_{xx} は $f(x)$ の x^* における Hessian 行列である。よって、グラジエント法によって得られた試行点 x^i が解 x^* に充分近づいたとき、共軛勾配法が用いられ

ているなら、2次函数に対するときには似た急速な収束が期待できると考えられる。

一般の非線型目的函数に共軛方向法を適用するとき、グラジエントベクトルが必要ならば(3-6)に負号をつけることによって求め得ないので、個々の目的函数の偏導函数から計算する。 α^i を(3-5)によって定めることはできない。1次元探索により α についての函数

$$f(x^i + \alpha d^i), \quad \alpha > 0 \quad (3-24)$$

を最小ならしめる α , α_{\min}^i を求めて、(3-4)中の α^i にあてる。

本章では、共軛方向法に属するもののうち、§2において共軛勾配法と、Fletcher-Reeves²法(FR法)、§3においてDavidon-Fletcher-Powell^{3,4}法(DFP法)について述べる。§3においては、数値誤差に起因するDFP法の不安定性を防ぐための著者による方法を与える。⁵

DFP法について言えば、第4章⁶において、著者による感度解析法への拡張を述べ、第5章において、函数空間への拡張を述べると共に著者によるその拡張法の数値計算機構⁷を与える。また、第II篇においてプロセス最適化の為、感度解析法、函数空間への拡張法も含め、DFP法が使用され検討されている。また、計算法としての有効さの比較のため、FR法も第II篇で使用されている。

§2 共軛勾配法

2次形式目的函数(3-1)に対して、共軛方向法の探索方向 d^i を次のように定めるものが共軛勾配法¹である。

$$d^{i+1} = r^{i+1} + \beta^i d^i \quad (3-25)$$

$$\beta^i = \frac{r^{i+1} \top r^{i+1}}{r^i \top r^i} \quad (3-26)$$

$$d^0 = r^0 \quad (3-27)$$

共軛勾配法の一般非線型目的函数への拡張法はFletcher & Reeves²によって与えられた。Fletcher-Reeves法(FR法)は前節の共軛方向法の一般非線型目的函数への拡張に従ってなされる。(3-25)～(3-27)の残差ベクトル r^i はグラジエントベクトルに負号をつけたものでもあったので、これには、目的函数のグラジエントベクトルを符号を考慮してあてる。FR法は、

$$\begin{cases} d^{i+1} = -g^{i-1} + \beta^i d^i \end{cases} \quad (3-28)$$

$$\begin{cases} \beta^i = \frac{g^{i+1T} g^{i+1}}{g^{iT} g^i} \end{cases} \quad (3-29)$$

$$\begin{cases} d^0 = -g^0 \end{cases} \quad (3-30)$$

FR法はこの様な簡単なおきかえによって、共軛勾配法を一般の目的函数に拡張したものである。おきかえの仕方についてみると、(3-1)のAの代りに $f(x)$ のHessian行列を求めてこれを、(3-5)、(3-6)に代入して使用することをしていない。それ故、目的函数の2階偏導函数の計算はする必要がない。しかし、2次形式目的函数のときとは異り、 α_{\min}^i を求めるために1次元探索をしなければならぬ。

§3 Davidon-Fletcher-Powell法

この方法も共軛方向法の一つであるが、前法と異り、はじめから一般の非線型目的函数の最小化の為にDavidon³により、ついでそれがFletcher & Powell⁴により洗練されて提出された。

解を得るまでの探索繰返しが少ないことの理論的根拠は、この方法も共軛方向法の一つであるということによっているが、数値計算経験から知られる強かさ故に、重要な方法とされている。また、後述する様に擬Newton法としての意味もあり、グラジエント法の発達 of 歴史の中でHestenes & Stiefelのそれとならぶ画期的な方法であるといえよう。

Davidon-Fletcher-Powell法(DFP法)をFletcher & Powell⁴に従って述べる。

一般の非線型目的函数 $f(x)$ で2階連続微分可能なものを考える。

i 番目の探索試行点 x^i が得られているとき、 $i+1$ 番目の探索点 x^{i+1} は次の手順によって決定される。

$$x^{i+1} = x^i + \alpha_{\min}^i d^i \quad (3-31)$$

$$d^i = -H^i g^i \quad (3-32)$$

$$H^i = H^{i-1} + A^{i-1} + B^{i-1} \quad (3-33)$$

こゝに

$$A^{i-1} = \frac{\sigma^{i-1} \sigma^{i-1T}}{\sigma^{i-1T} \gamma^{i-1}} \quad (3-34)$$

$$B^{i-1} = - \frac{(H^{i-1} \gamma^{i-1})(H^{i-1} \gamma^{i-1})^T}{\gamma^{i-1T} H^{i-1} \gamma^{i-1}} \quad (3-35)$$

$$\sigma^{i-1} = x^i - x^{i-1} \quad (3-36)$$

$$\gamma^{i-1} = g^i - g^{i-1} \quad (3-37)$$

α_{\min}^i は § 1 に述べた通り, (3-24)を最小とする α であって, 1次元探索によって求められる。目的函数が2次形式のとき, α_{\min}^i は(3-5)の α^i を用いればよい。 g^i は x^i における $f(x)$ のグラジエントベクトルであって, 目的函数が2次形式であれば, (3-6)の残差ベクトルに負号をつけたものがこれに等しい。

H^0 は任意の正定値対称行列, 例えば, $H^0 = E$ (E : 単位行列), をとる。

DFP法の安定性は, Fletcher & Powell⁴ によって証明されているが, その証明過程においては, 丸めの誤差は存在しないとしており, また, 1次元探索は近似でなく, 厳密に行われるとしている。しかしながら, 実際の計算においては数値計算を実行するとき, 丸めの誤差が存在する上に, 1次元探索の解を近似的にししか求め得ないので, 安定でなくなることもある。

不安定となった実例は第Ⅱ篇第5章 § 3 に与えるが, 1次元探索が近似に過ぎないことに由来する不安定性を防止するための著者による方法を与える為, ここでは, Fletcher & Powell⁴ に従って, 安定性の証明を述べておく。

安定の証明は, H^{i-1} が正定値対称となるとき, (3-33) ~ (3-37) によって H^i を定めれば, これも又, 正定値対称なることを証明することにある。これが証明されれば, H^0 を正定値対称にとるのであるから, 任意の i に対し, H^i は正定値対称となる。そして, (1-10)により,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial d^i} &= \frac{\sum_{j=1}^n d_j^i \frac{\partial f}{\partial x_j}}{\|d^i\|} \\ &= - \frac{(H^i g^i)^T g^i}{\|d^i\|} \\ &< 0 \end{aligned} \quad (3-38)$$

充分小なる $\alpha > 0$ で, 次式を満足するものが存在する。

$$f(x^i + \alpha d^i) < f(x^i) \quad (3-39)$$

証明は次の通りである。ゼロでない任意のベクトル x をとる。

$$\begin{aligned} x^T H^i x &= x^T H^{i-1} x + \frac{x^T \sigma^{i-1} \sigma^{i-1 T} x}{\sigma^{i-1 T} \gamma^{i-1}} - \frac{x^T (H^{i-1} \gamma^{i-1}) (H^{i-1} \gamma^{i-1})^T x}{\gamma^{i-1 T} H^{i-1} \gamma^{i-1}} \\ &= \frac{(x^T H^{i-1} x) \cdot (\gamma^{i-1 T} H^{i-1} \gamma^{i-1}) - (x^T H^{i-1} \gamma^{i-1})^2}{\gamma^{i-1 T} H^{i-1} \gamma^{i-1}} \\ &\quad + \frac{(x^T \gamma^{i-1})^2}{\sigma^{i-1 T} \gamma^{i-1}} \end{aligned} \quad (3-40)$$

右辺第1項は、Schwarzの不等式により、正かゼロである。そして、

$$x + c \gamma^{i-1} = 0, \quad c \neq 0 \quad (3-41)$$

なるときのみ、ゼロである。

$$\begin{aligned} \gamma^{i-1 T} \sigma^{i-1} &= g^{i T} \sigma^{i-1} - g^{i-1 T} \sigma^{i-1} \\ &= -g^{i-1 T} \sigma^{i-1} \\ &= \alpha_{\min}^{i-1} g^{i-1 T} H^{i-1} g^{i-1} \\ &> 0 \end{aligned} \quad (3-42)$$

(3-41)がなりたつとき、(3-42)より

$$\begin{aligned} x^T \sigma^{i-1} &= -c \gamma^{i-1 T} \sigma^{i-1} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3-43)$$

よって、(3-41)が成立つか否かに拘らず、(3-40)は常に正となる。

(3-42)が成立つためには、次の関係を用いている。

$$g^{i T} \sigma^{i-1} = 0 \quad (3-44)$$

(3-44)が成立つのは、1次元探索が完全に行われたとした場合であり、このことが、以下に述べる問題の原因になっている。

DFP法を実際に計算する場合、1次元探索が近似的な α_{\min}^i しか求めないため、上の安定性証明にも拘らず、数値計算上不安定となる原因を明らかにし、不安定性の著者による防止法を述べる。

(3-34)に与えた A^{i-1} 項の代りに、次式の A^{i-1} を用いることにより、数値不安

定性が除去できる。

$$A^{i-1} = \frac{\sigma^{i-1} \sigma^{i-1 T}}{-\sigma^{i-1 T} g^{i-1}} \quad (3-45)$$

1次元探索が正確に行われていないとすれば, (3-44)は成立たない。 $\|\sigma^{i-1}\|$ が過小に求められたとき, (3-44)は

$$g^{iT} \sigma^{i-1} < 0 \quad (3-46)$$

でおきかえられなければならない。 $\|\sigma^{i-1}\|$ が過小に求められ,

$$|g^{iT} \sigma^{i-1}| > |g^{i-1 T} \sigma^{i-1}| \quad (3-47)$$

なるとき, (3-42)はなりたらず, 安定性の保証も失われる。正確に1次元探索が行われたとき, (3-34)と(3-45)とは同等であるから, この2式のおきかえは原理論を損うものではない。

第II篇にあげる不安定となった例において, A^{i-1} 項を(3-45)におきかえることによって不安定性を恢復させ得た。

既に述べた通り, DFP法は共軛方向法的一种である。ここにDFP法の別の位置づけを与える。

探索方向 d^i を x^i における $f(x)$ のグラジエントベクトル g^i から決定する手順を, 最急降下法, DFP法, Newton法について比較する。

$$d^i = -M g^i \quad (3-48)$$

とおいたとき, 最急降下法については,

$$M = E \quad (E: \text{単位行列}) \quad (3-49)$$

DFP法については,

$$M = H^i \quad (3-50)$$

Newton法については,

$$M = \left(\frac{\partial^2 f(x^i)}{\partial x_j \partial x_k} \right)^{-1} \quad (3-51)$$

DFP法を2次形式目的函数(3-1)に適用したとき, 数値誤差がなければ n 回の探索繰返しの後, 次の関係がなりたつことが証明されている。⁴

$$H^n = \left(\frac{\partial^2 f(x^n)}{\partial x_j \partial x_k} \right)^{-1}$$

$$=A^{-1} \quad (3-52)$$

(3-48)によって d^i を決定する任意のグラジエント法において, M が正定値であれば, i 回の探索の安定性は保証される。最急降下法とNewton法の既述の欠点を免れたDFP法では, この M 行列としてはじめ, 任意の正定値行列を H^0 として用い, 2次形式目的函数についてならぬ回の繰返しの後, Newton法における M 行列に H^i を一致させる。この際, Hessian行列の計算を直接行うことはしていないことに注意する。

(3-52)の関係は次章における感度解析法の基礎にもなっている。

最後に, DFP法について, x^i における d^i 方向での目的函数 $f(x)$ の導函数がいかなるものか, 検討する。(1-10)において $z = d^i$ より,

$$\frac{\partial f}{\partial d^i} = \frac{d^{iT} g^i}{\|d^i\|} \quad (3-53)$$

ここで, ノルム $\|z\|$ を次の様にとりとする。

$$\|z\| = (z^T (H^i)^{-1} z)^{1/2} \quad (3-54)$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{z^T g^i}{(z^T (H^i)^{-1} z)^{1/2}} \quad (3-55)$$

を負かつ絶対値最大ならしめる $\|z\| = C$ なる z は,

$$\begin{aligned} z &= -H^i g^i \\ &= d^i \end{aligned} \quad (3-56)$$

即ち, DFP法は(3-54)によって各繰返し回毎にノルムを定義するものとすれば, (3-54)のノルムについて, 最急降下法になっている。

References

- 1 Hestenes, M.R., and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol.49, 1952, pp.409-436.
- 2 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.
- 3 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 4 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 5 高松, 佐山, 大井: 2次収束グラジエント法による抽出プロセスの最適設計, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.313-321.
- 6 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: An extension of the Davidon-Fletcher-Powell method to sensitivity analysis, (未発表).
- 7 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: Computational schemes of the Davidon-Fletcher-Powell method in infinite dimensional space, (未発表).

第4章

Davidon-Fletcher-Powell 法の
感度解析への拡張

§1 序

化学プロセスにおいてもそうであるが、実際上の最適化問題については、最小点のみならず、最小点の近傍での目的函数の挙動を知ることが望ましい場合がしばしばである。なぜならば、求められた最小点でプロセスを設計ないしは操作する際、そのための計測や調節を厳密に行うことが安価に、あるいは容易に行えないことがあるからである。厳格に最小点を保持して設計、操作しなくとも、プロセスの性能が無視しうるほどわずかに低下しないことが知られているならば、近似的に最小点附近で設計、操作をすれば充分であろう。

ここでいう函数の挙動とは、独立変数が最小点から微小量変動したときの目的函数値の変化を指す。そして、この変化を「感度」と呼ぶ。

本章では、第3章§3に述べた Davidon-Fletcher-Powell 法 (DFP法)^{1,2} を拡張することによって、簡単にして有効な感度解析法³を与える。

この感度解析法によれば、上述の意味の感度解析をするのみでなく、DFP法の探索手順が終止したとき、実際に局所的に最小なる点に到達しているか否かを明らかにすることもできる。

この感度解析法の数学的基礎は、次節に詳しく述べるが、DFP法において1次元探索方向を決定する行列が最小点における目的函数の Hessian 行列に収束するという事実と、正則行列 M と M^{-1} のそれぞれの固有値と固有ベクトルの間の関係とである。

この方法においては、DFP法の1次元探索方向決定行列 H^i についての固有値問題を解く。そして、目的函数を最小点の近傍で近似した2次函数が得られ、この函数から、最小点近傍における目的函数の形状を幾何学的に明瞭に知ることができ。

この感度解析法は、目的函数の Hessian 行列を直接求めて、それを用いる方法よりも、遙かに容易な方法である。

§2 感度解析法の数学的基礎

DFP法は第3章§3に述べたように、 n 変数の2次式目的函数

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c \quad (4-1)$$

に適用されたとき，丸めの誤差，1次元探索の近似の誤差がないとすれば，探索手順を n 回繰返した後において，最小点を与え，かつ1次元探索方向を決定する行列 H^i は2次の項の係数行列の逆行列に一致する。

$$H^n = A^{-1} \quad (4-2)$$

勿論， A は正値対称行列であるとする。

次に一般の非線型の目的函数の場合を考える。目的函数 $f(x)$ は2階連続微分可能とし，また，少なくとも1ヶの局所最小点 x^* を持つとする。

任意の点のまわりで， $f(x)$ はTaylor級数展開の1次，2次項で近似でき，1次の項は x^* のまわりで展開したときゼロとなる。 x^* のまわりでの $f(x)$ のTaylor級数展開による函数 $f(x)$ の近似式は

$$f_0(x) = f(x^*) + \frac{1}{2}(x-x^*)^T f_{xx}(x-x^*) \quad (4-3)$$

ここに， f_{xx} は x^* における $f(x)$ のHessian行列である。第3章§1において述べた様に， x^* の充分な近傍で $f(x)$ が(4-3)で近似されることが，DFP法を含めた共軛方向法が一般の非線型目的函数に対しても有効であるということの根拠になっている。2次形式目的函数(4-1)に対して，DFP法を適用したとき，(4-2)が成立つこと，DFP法が一般非線型函数にも有効であるということが，感度解析法の以下に述べる第1の基礎を与えている。

x の x^* からの変動による函数 $f_0(x)$ の値の変化は

$$F_0(x) = f_0(x) - f(x^*) \quad (4-4)$$

これは，次の函数の2次函数近似である。

$$F(x) = f(x) - f(x^*) \quad (4-5)$$

DFP法で適当な点から探索を開始し，1次元探索を充分な回数繰返した後，最小点 x^* の近傍にある点 x^l に到達する。そのとき，行列 H^l が x^l における $f(x)$ のHessian行列の逆に近づいていると考えることは妥当であろう。

函数 $f(x)$ の x^* におけるHessian行列 f_{xx} は，2次函数 $f_0(x)$ の曲面形を決定する。よって，DFP法によって x^* に充分近い点 x^l が得られたならば，2次形式函数

$$F_5(x) = \frac{1}{2}(x-x^*)^T (H^l)^{-1} (x-x^*) \quad (4-6)$$

は函数 $F_0(x)$ を良く近似しているものと考えられる。

感度解析法の第2の数学的基礎であって，この方法の利点を導き出す源となっている事項は，正則行列の固有値，固有ベクトルの持つ関係である。即ち，

第2の数学的基礎は、任意の正則行列 M の固有値は、 M^{-1} の固有値の逆数であり、 M と M^{-1} の固有ベクトルは同じものである、という関係である。

§3 感度解析法

非線型函数

$$f(x) \quad x \in X \quad (4-7)$$

を最小とする x を決定する最適化問題を考える。束縛条件は存在しないとする。また、 $f(x)$ は2階連続微分可能で、少なくとも1ヶの局所最小点を持つとする。 X は n 次元空間とする。

DFP法は、明らかに上の問題に適用できる。DFP法の探索手順を充分な回数繰返した後、或る局所最適点 x^* に充分近い x^e に到達したとし、 H^e は x^e における $f(x)$ の Hessian 行列 f_{xx} の逆に充分近づいているとする。

感度解析法は以下の手順で行われる。

第1に、DFP法の探索手順を終止したときの H^e 行列を取って、これのすべての固有値 λ_j , $j=1, \dots, n$ とそれらに対応する正規化された直交固有ベクトル v_j , $j=1, \dots, n$ とを求める。ここで、いかなる λ_j についても H^e は正定値であることから、 λ_j はすべて正である。

$1/\lambda_j$, $j=1, \dots, n$ が $(H^e)^{-1}$ の固有値であり、 v_j , $j=1, \dots, n$ が対応する固有ベクトルである。仮定されていることより、

$$\frac{1}{\lambda_j} \quad j=1, \dots, n \quad (4-8)$$

$$v_j \quad j=1, \dots, n \quad (4-9)$$

を、それぞれ f_{xx} の固有値とそれらに対応した固有ベクトルの近似と考えることは妥当である。よって、(4-8), (4-9) で与えられた固有値と固有ベクトルとは、 x^* のまわりでの $f(x)$ の挙動についての情報を含んでいる。

次の直交行列を考えよう。

$$V = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n) \quad (4-10)$$

この V について次の関係が成立つ。

$$(H^e)^{-1} V = V \begin{pmatrix} 1/\lambda_1 & & 0 \\ & 1/\lambda_2 & \\ 0 & & \dots & 1/\lambda_n \end{pmatrix} \quad (4-11)$$

(4-11) は次の関係を与える。

$$x^T (H^{\ell})^{-1} x = (x')^T \begin{pmatrix} 1/\lambda_1 & & 0 \\ & 1/\lambda_2 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & 1/\lambda_n \end{pmatrix} x', \quad x' \in X' \quad (4-12)$$

ここに x' は 1 次変換

$$x = V x', \quad x \in X \quad (4-13)$$

によって決定されるベクトルである。

よって,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (x - x^{\ell})^T (H^{\ell})^{-1} (x - x^{\ell}) \\ &= \frac{1}{2} (x' - x'^{\ell})^T \begin{pmatrix} 1/\lambda_1 & & 0 \\ & 1/\lambda_2 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & 1/\lambda_n \end{pmatrix} (x' - x'^{\ell}) \end{aligned} \quad (4-14)$$

ここに

$$x^{\ell} = V x'^{\ell} \quad (4-15)$$

幾何学的に見れば, $v_j, j=1, \dots, n$ は楕円体

$$F_S(x) = k \quad k > 0 \quad (4-16)$$

の主軸であり, v_j 方向への直径は $\sqrt{2k\lambda_j}$ である。

観点をかえれば, 中心 x^{ℓ} , 半径 r の球上において, $F_S(x)$ は v_j の方向で $(\frac{1}{2})(\frac{1}{\lambda_j})r^2$ なる値を持つ。

任意の $x \in X$ に対して, 次式が成立つ。

$$\begin{aligned} F_S(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\lambda_1} \{v_1^T (x - x^{\ell})\}^2 + \frac{1}{\lambda_2} \{v_2^T (x - x^{\ell})\}^2 + \right. \\ \left. \dots + \frac{1}{\lambda_n} \{v_n^T (x - x^{\ell})\}^2 \right] \end{aligned} \quad (4-17)$$

$F_S(x)$ は変動 $x - x^{\ell}$ に対する $f(x)$ の感度と呼ぶことができる。

$\frac{1}{\lambda_j}, j=1, \dots, n$ は任意方向の感度を与えると共に, x^{ℓ} (または x^*) の近傍での函数値の推定を可能ならしめる。

また, 固有値と固有ベクトルから, 最大感度, 最小感度の方向が知り得ると共に, 更にその上, $F_0(x) = k$ または $F(x) = k$ を近似する楕円体 $F_S(x) = k$ の曲面形の情報も得られる。

§4 検 討

固有値と固有ベクトルとを直接に Hessian 行列から求めようとすれば、以下のことをしなければならない。まず、Hessian 行列の式を目的函数から導かなければならない。次にその計算プログラムを作り、最後に計算を実行しなければならない。多くの実際上の問題では、目的函数、1階偏導函数、2階偏導函数の形は複雑であり、しかもこの順で複雑化してゆく。よって、上の3段階のことを実行することは、面倒なことである。

他方、DFP法においては、 H^l なる行列は全くこの方法の探索手順を繰返したことの副産物に過ぎず、 H^l を生成するために、 $f(x)$ 自身と $f(x)$ の1階偏導函数を用いるのみで、2階偏導函数を必要としない。

感度解析のために求めるべきものは Hessian 行列ではなく、固有値と固有ベクトルである。なぜなら、 $F(x)$ を近似する2次形式函数の式を求めたいのではなく、 x^* のまわりでの $f(x)$ の挙動、感度を知りたいのである。

特別な形をした Hessian 行列について、あるいは特定の方向における以外は、 $f(x)$ の形状や感度は Hessian 行列からは知りえない。

固有値と固有ベクトルは、主軸とその直径とによって、近似楕円体の幾何学的な形状を示す。そして、 $F(x)$ の近似たる $F_2(x)$ の函数値は(4-17)により容易に与えられる。

さらに、この感度解析法によって、到達点 x^l が真に局所的最適点の良い近似になっているかどうかを知ることができる。

グラジエント法においては、局所最小点が得られたか否かを知るためには、次のような方法が採られてきた。その第1は、得られた点 x^l のまわりを走査してみることである。しかし、これは高次元の問題では計算量が多くなる。第2のそれは、いくつかの出発点から探索をしていって、最小点を求めるやり方である。いくつかの出発点から x^l に到達したのなら、 x^l が局所最小点であるとしてさしつかえないであろう。

ここで与えた感度解析法によれば、 $F_2(x)$ の値が函数

$$F_2(x) = f(x) - f(x^l) \quad (4-18)$$

の値といくつかの方向、例えば固有ベクトルの方向において一致していれば、 $F_2(x)$ は $F_2(x)$ を良く近似しているといえるであろう。 $F_2(x)$ は狭義の凸函数であるから、 x^l は停留点であるばかりでなく、 $f(x)$ の局所最小点の良い近似になっていることも分る。

数値計算例としては、抽出プロセスの最適化における感度解析の結果があり

、第Ⅱ篇第4章に与えられている。その例においては、本法は良い成績を挙げている。

最後に、この感度解析法により、DFP法の H^i 行列が、さらに有効なものとなったことを指摘する。

また、グラジエント法について、従来多くの拡張、発展、数値計算実験などが行われてきているが、グラジエント法を感度解析の方面に拡張したのは、この研究が最初であろう。

References

- 1 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 2 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 3 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: An extension of the Davidon-Fletcher-Powell method to sensitivity analysis, (未発表).

第5章 Davidon-Fletcher-Powell 法の 函数空間への拡張とその計算機構

§1 序

Davidon-Fletcher-Powell^{1,2} 法 (DFP法) は有限次元の空間における函数を対象としてその最小点を求めるものであった。DFP法も共軛方向法の一つであるという意味で、この方法の有効性が主張されることは、第3章§3に述べた。また、第Ⅱ篇第5章に掲げる数値計算例、その他の計算例³によってもその有効さが認められる。従って、この方法を函数空間に拡張するということは、単なる数学理論上の拡張の可能性を知りたいということに留まらず、最適制御問題を解く為などの函数空間における汎函数の最小化問題を数値的に解こうとする立場からも要請されることである。

DFP法は Horwitz & Sarachik⁴ と Tokumaru, Adachi, & Goto⁵ によって、独立に函数空間へ拡張された。論点の相違はあるにしても、両者の拡張の仕方は同じであるといってもよい。前者は、ダイアディック表示法 (dyadic notation) によって拡張法を表現しているのに対し、後者は、ベクトル内積によって表現しているが、この相違はほとんど記号法上の相違といってよく、特に後に論ずる計算機構については、全く同じものが導かれる。

著者は、積分核を用いて、この拡張法が全く別の形によっても表しうることを示した。⁶ この別の形の表現は、数学的に別の表し方が出来たということ、有限次元の場合の「行列」としてみた作用素 H^1 に対応するものを、無限次元空間への拡張においても与えるという興味以上に、より重要な意義を持っている。それは、この著者による積分核を用いた表現に従って数値計算手順を定めることによって、Horwitz et al., Tokumaru et al. による表現に従って導かれた計算手順にみられる欠点、即ち、探索繰返し回数の増加に従って計算機の所要メモリが増加するという欠点を除くことができることである。

本章ではまず、Horwitz et al.⁴, Tokumaru et al.⁵ による表現と著者による表現⁶ を与える。次いで、この2通りの表現に従って導かれる数値計算機構について論じる。また、所要計算機メモリを減少させる為に、多項式近似する。著者によって考案された方法を述べる。さらに、著者による表現に従った計算機構による数値計算例を与える。⁶ この例においては、DFP法は好成績を収めている。

§ 2 ダイアディック表示法による表現

本節では, Horwitz et al. によるダイアディック表示法を用いた表現に従って, Horwitz et al.⁴と Tokumaru et al.⁵による DFP法の函数空間への拡張法を与える。前節で述べたように, Horwitz et al. と Tokumaru et al. とは独立に, DFP法を Hilbert 空間に拡張したが, 拡張法の表わし方について, 両者の間に本質的な相違はないので, ここではダイアディック表示法による表現のみを与える。

次の2次形式汎函数を最小ならしめる要素 $x^* \in X$ を求める問題を考える。

$$J(u) = \frac{1}{2} \langle u, Gu \rangle + \langle u, w \rangle + J. \quad (5-1)$$

ここに X は実 Hilbert 空間, $u, w \in X$ であって, $\langle u, w \rangle$ は内積を表わす。 G は X における線型自己共軛作用素であって, 次の関係をみたす。

$$m \|u\|^2 \leq \langle Gu, u \rangle \leq M \|u\|^2, \quad 0 < m \leq M, \quad u \in X \quad (5-2)$$

u における汎函数 J のグラジエントベクトルは

$$g(u) = Gu + w \quad (5-3)$$

最小化問題の解は

$$u^* = -G^{-1}w \quad (5-4)$$

この問題を解くための DFP法の Hilbert 空間への拡張法の繰返し手順は次の通りである。

$i+1$ 回目の繰返しでは, 点 u^i から出発して1次元探索方向

$$d^i = -H^i g^i \quad (5-5)$$

上において, 汎函数 J を最小ならしめる点 u^{i+1} を求める。よって, u^{i+1} は次式で与えられる。

$$u^{i+1} = u^i + \alpha_{\min}^i d^i \quad (5-6)$$

ここで, α_{\min}^i は, 正なる α について $J(u^i + \alpha d^i)$ を最小ならしめる α であることは, 第1章 §5 に同じである。

H^i は次の方程式により定義される。

$$H^i = H^{i-1} + A^{i-1} + B^{i-1} \quad (5-7)$$

$$A^{i-1} = \frac{\sigma^{i-1} \langle \sigma^{i-1} |}{\langle \sigma^{i-1}, \gamma^{i-1} \rangle} \quad (5-8)$$

$$B^{i-1} = - \frac{H^{i-1} \gamma^{i-1} \langle H^{i-1} \gamma^{i-1} |}{\langle \gamma^{i-1}, H^{i-1} \gamma^{i-1} \rangle} \quad (5-9)$$

$$\gamma^{i-1} = g^i - g^{i-1} \quad (5-10)$$

$$\sigma^{i-1} = u^i - u^{i-1} \quad (5-11)$$

ここで、 X における作用素 L がダイアディック表示法によって

$$L = X \rangle \langle Y \quad (5-12)$$

で表わされるとき

$$\begin{aligned} L Z &= X \rangle \langle Y Z \\ &= X \langle Y, Z \rangle \end{aligned} \quad (5-13)$$

である。

u^{i+1} が求められたならば、 g^{i+1} を計算し、 $i = i+1$ と置く。そして、上の手順を最小点が得られる迄繰返す。

初回の H^i 作用素、即ち H^0 は X における任意の狭義の正定値線型自己共転作用素とする。例えば、 H^0 は恒等作用素にとればよい。

2次形式でない汎函数に対しても、2次形式のものに対すると同様、繰返し手順の安定性は保証される。ここで、安定性が保証されるとは、第1章§3におけると同様、

$$u = u^i + \alpha d^i, \quad \alpha > 0 \quad (5-14)$$

とするとき

$$J(u) < J(u^i) \quad (5-15)$$

とすることができることである。

§3 積分核による表現

本節では、著者によって与えられた、⁶DFP法の積分核による表現を述べる。積分核によって表現された拡張法も、表現の仕方以外は前節の拡張法に同じで

ある。本節の表現に従って導かれた数値計算法とその利点は、次節以下に詳述する。

R 空間上の有界閉区間 $[t_0, t_f]$ 上で定義された n ベクトル函数よりなる Hilbert 空間を考える。

内積を次のように定義する。

$$\begin{aligned}\langle x, y \rangle &= \int_{t_0}^{t_f} x(t)^T y(t) dt \\ &= \int_{t_0}^{t_f} \sum_{j=1}^m x_j(t) y_j(t) dt\end{aligned}\quad (5-16)$$

ここに

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix}, \quad y(t) = \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ \vdots \\ y_n(t) \end{bmatrix}$$

$x \in X$ のノルムは、

$$\|x\| = \langle x, x \rangle^{1/2} \quad (5-17)$$

目的汎函数は、前節の式 (5-1) と同じであって

$$J(u) = \frac{1}{2} \langle u, Gu \rangle + \langle u, w \rangle + J_0 \quad (5-18)$$

ただし、 u, w は上に述べた空間 X の要素である。

以下にこの空間における DFP 法の拡張法の積分核による表現を掲げる。

$i+1$ 回目の探索において、方程式

$$d^i = -H^i g^i \quad (5-19)$$

によって 1 次元探索方向を定める線型作用素 H^i を、次式によって定義する。

$$H^i = H^{i-1} + A^{i-1} + B^{i-1} \quad (5-20)$$

$$A^{i-1} u = \int_{t_0}^{t_f} A_k^{i-1}(s, t) u(t) dt \quad (5-21)$$

$$B^{i-1} u = - \int_{t_0}^{t_f} B_k^{i-1}(s, t) u(t) dt \quad (5-22)$$

ここに、 $A_k^{i-1}(s, t)$ と $B_k^{i-1}(s, t)$ とは $t_0 \leq s \leq t_f$, $t_0 \leq t \leq t_f$ において定義された積分核を要素として持つ $m \times n$ 行列である。即ち、

$$A_k^{i-1}(s, t) = \begin{pmatrix} A_{11}^{i-1}(s, t) & A_{12}^{i-1}(s, t) & \cdots & A_{1n}^{i-1}(s, t) \\ A_{21}^{i-1}(s, t) & A_{22}^{i-1}(s, t) & \cdots & A_{2n}^{i-1}(s, t) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1}^{i-1}(s, t) & A_{n2}^{i-1}(s, t) & \cdots & A_{nn}^{i-1}(s, t) \end{pmatrix} \quad (5-23)$$

$$B_k^{i-1}(s, t) = \begin{pmatrix} B_{11}^{i-1}(s, t) & B_{12}^{i-1}(s, t) & \cdots & B_{1n}^{i-1}(s, t) \\ B_{21}^{i-1}(s, t) & B_{22}^{i-1}(s, t) & \cdots & B_{2n}^{i-1}(s, t) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ B_{n1}^{i-1}(s, t) & B_{n2}^{i-1}(s, t) & \cdots & B_{nn}^{i-1}(s, t) \end{pmatrix} \quad (5-24)$$

ここに, $A_{\ell m}^{i-1}(s, t)$, $B_{\ell m}^{i-1}(s, t)$, $1 \leq \ell \leq n$, $1 \leq m \leq n$ は次のようなものである。

$$A_{\ell m}^{i-1}(s, t) = \frac{\gamma_{\ell}^{i-1}(s) \sigma_m^{i-1}(t)}{\int_{t_0}^{t_f} \sigma^{i-1}(t)^T \gamma^{i-1}(t) dt} \quad (5-25)$$

$$B_{\ell m}^{i-1}(s, t) = \frac{(H^{i-1} \gamma^{i-1})_{\ell}(s) (H^{i-1} \gamma^{i-1})_m(t)}{\int_{t_0}^{t_f} \gamma^{i-1}(t)^T (H^{i-1} \gamma^{i-1})(t) dt} \quad (5-26)$$

ただし,

$$\sigma^{i-1}(t) = u^i(t) - u^{i-1}(t) \quad (5-27)$$

$$\gamma^{i-1}(t) = g^i(t) - g^{i-1}(t) \quad (5-28)$$

H^0 は X における任意の狭義の正定値線型作用素が選ばれればよい。例えば, 恒等作用素を選ぶ。次のような形の作用素も H^0 として選ぶことができる。

$$H^0 u = \int_{t_0}^{t_f} H_k^0(s, t) u(s) ds \quad (5-29)$$

ここに

$$H_k^0(s, t) = \begin{pmatrix} H_{11}^0(s, t) & H_{12}^0(s, t) & \cdots & H_{1n}^0(s, t) \\ H_{21}^0(s, t) & H_{22}^0(s, t) & \cdots & H_{2n}^0(s, t) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{n1}^0(s, t) & H_{n2}^0(s, t) & \cdots & H_{nn}^0(s, t) \end{pmatrix} \quad (5-30)$$

であって、 $H_{\ell m}^0(s, t)$ は、 $t_0 \leq s$, $t \leq t_f$ において定義された核である。
 A^{j-1} , B^{j-1} の間に次の関係が成り立つ。

$$\sum_{j=1}^i (A^{j-1} + B^{j-1}) u = \int_{t_0}^{t_f} \sum_{j=1}^i (A_k^{j-1}(s, t) + B_k^{j-1}(s, t)) u(s) ds \quad (5-31)$$

(5-31)が前節のダイヤデック表示法による表現から導かれるものとは全く異った数値計算機構を与えることは、次節に詳述する。

計算手順において、各繰返し毎に行われる1次元探索は、前節におけると同様に行われる。

積分核による拡張法の表現は、一見したところ、前節のダイヤデック表示法によるそれと全く異なる様にみえるが、この両者は、本節で考えている空間については、互いに同等である。よって、安定性、G-conjugateであることなどの証明は、本節の方法に対しては改めて与える必要はなく、Tokumaru et al.⁵ によるものによればよい。

拡張法を積分核によって表したことの意味は次の通りである。

第1に、ダイヤデック表示法による表現によって与えられるものとは異った拡張法に対する解釈が与えられる。第2に、核 A^i , B^i の行列の要素は、有限次元空間におけるDFP法的作用素を与えていた、(3-34)(3-35)の「行列」に対応するものになっている。第3に、この積分核による表現が、計算手順の繰返しの回数増加に従って、所要計算機記憶量が増えることのない数値計算手順を与える。これらの中で、最後の項目が最も重要である。

§4 両表現から導かれる計算機構

Tokumaru et al.⁵ は彼らの拡張法の欠点として、計算機に記憶させるべき情報が探索繰返し回数と共に増加することを指摘している。本節においては、著者による拡張法の表現に従って導かれた計算機構により、この欠点が除かれること⁶を明らかにする。

はじめに、ダイアディック表示法によって表現される、Horwitz et al.⁴, Tokumaru et al.⁵ の拡張法に従って導かれる計算機構について述べる。

1次元探索方向 d^i を (5-5) ~ (5-9) によって計算するためには、グラジエントベクトル g^i を、作用素 $H^0, A^j, B^j, j=1, \dots, i-1$ のそれぞれによって変換し、変換されたものを加え合さなければならない。即ち、1次元探索方向

$$\begin{aligned} d^i &= -H^i g^i \\ &= -(H^0 + \sum_{j=1}^{i-1} (A^j + B^j)) g^i \end{aligned} \quad (5-32)$$

は、数値計算を実行するときには、(5-33)に示すように g^i を $H^0, A^j, B^j, j=1, \dots, i-1$ で変換してから加え合せて求められる。

$$d^i = -(H^0 g^i + \sum_{j=1}^{i-1} (A^j g^i + B^j g^i)) \quad (5-33)$$

ここで、§2の A^i, B^i の定義に従って、

$$A^j g^i = \frac{\langle \sigma^j, g^i \rangle}{\langle \sigma^j, \gamma^j \rangle} \sigma^j \quad (5-34)$$

$$B^j g^i = -\frac{\langle H^j \gamma^j, g^i \rangle}{\langle \gamma^j, H^j \gamma^j \rangle} H^j g^j \quad (5-35)$$

(5-33)の右辺の全項の計算を実行する為には、(5-36), (5-37)によえる諸要素が計算機に記憶されていなければならない。

$$\sigma^j / \langle \sigma^j, \gamma^j \rangle^{1/2}, \quad j=1, \dots, i-1 \quad (5-36)$$

$$H^j \gamma^j / \langle \gamma^j, H^j \gamma^j \rangle^{1/2}, \quad j=1, \dots, i-1 \quad (5-37)$$

よって、上述の如く、作用素 H^i のための計算機の所要記憶量は、探索繰返しの回数と共に増加する。

次に著者による積分核を用いた表現に従って導かれる計算機構を与える。

1次元探索方向 d^i は、(5-31)により、(5-38)で計算される。

$$\begin{aligned} d^i &= -H^i g^i \\ &= -H^0 g^i - \int_{t_0}^{t_f} H_k^{i-1}(s, t) g^i(s) ds \end{aligned} \quad (5-38)$$

ただしここで,

$$H_k^{i-1}(s, t) = \sum_{j=1}^{i-1} (A_k^j(s, t) + B_k^j(s, t)) \quad (5-39)$$

また, H^0 が(3-29)で与えられるなら,

$$H^i g^i = \int_{t_0}^{t_f} H_{k0}^{i-1}(s, t) g^i(s) ds \quad (5-40)$$

ただし, このときは,

$$H_{k0}^{i-1}(s, t) = H_k^0(s, t) + \sum_{j=1}^{i-1} (A_k^j(s, t) + B_k^j(s, t)) \quad (5-41)$$

これによって分る様に, 作用素 H^i の為の情報, 即ち, 積分核の行列 $H_k^{i-1}(s, t)$ 又は $H_{k0}^{i-1}(s, t)$ の値の為の所要計算機記憶量が, 探索繰返し回数増加に伴って増すことはない。よって, いかに精密な解が要求される場合であっても, あるいは, 解への収束がおそい場合であっても, この計算機構によれば, 計算機内の記憶領域が不足することはなく, 計算機による演算実行の継続は可能である。

§5 多項式近似

前節のいずれの計算機構によっても, 与えられた問題を満足すべき精度で計算する為には, 非常に多くの計算機記憶量を要すると考えられる。それは, 作用素 H^i の情報を記憶する為に,

$$\sigma^j / \langle \sigma^j, \gamma^j \rangle^{1/2}, \quad j=1, \dots, i-1 \quad (5-42)$$

$$H^j \gamma^j / \langle \gamma^j, H^j \gamma^j \rangle^{1/2}, \quad j=1, \dots, i-1 \quad (5-43)$$

の値, 又は, 積分核による表現から導かれた機構については,

$$H_k^{i-1}(s, t) \quad (5-44)$$

$$H_{k0}^{i-1}(S, t)$$

(5-45)

のいずれかの値が記憶されなければならないからである。

区間 $[t_0, t_f]$ を余りに細く分割した点上のすべてでこれらのものの情報を記憶させようとするとき、少数回の探索繰返しの後計算を打ち切らなければならなくなるか、さもなければ、記憶領域の不足の為、探索を始める前から、全くこのDFP法の拡張法が適用できなくなる。このことは、このDFP法の函数空間への拡張法の実用性を大きく損う。この困難を避ける為、HorwitzはHilbert空間における問題に区分的に一定値をとるベクトル函数を導入して、準最適解を得ることができるようにした。⁷

著者によるところの、所要計算機記憶量を減らす方法を以下に与える。この方法は、多項式内挿法の応用である。⁶

DFP法を適用するに当って、計算機に記憶されるべきもので多くの記憶量を要するものは、次の(5-46)に示すものと、前に述べた H^i の情報とである。

$$u^i, u^{i-1}, g^i, g^{i-1}, H^i \gamma^i, H^{i-1} \gamma^{i-1}, \quad (5-46)$$

(5-46)に挙げたものは、最適制御問題において必要な精度で目的函数値を計算したり、微分方程式を解いたりする為に、区間 $[t_0, t_f]$ 上に密に取られた分割点上で、その値が記憶されなければならない。この(5-46)において挙げたベクトルの為の計算機記憶量は、探索繰返し数と共に増加するわけではない。そして、各ベクトルに対して、分割点の数だけ記憶量が要するのみである。

それに反して、 H^i に関する情報を記憶しようとするとき、事情はかなり困難になる。ダイヤティック表示法による表現から導かれた計算機構については、 H^i の情報、即ち、(5-42), (5-43)に与えたものの値を記憶しなければならず、その必要量は前述の様に探索繰返し回数と共に増加する。よって、充分な回数繰返しができる様にするには、ひとつの i についての必要記憶量が少ないことが望ましい。積分核の行列(5-44)、又は、(5-45)の値の為の記憶量は繰返し数にかかわらず、一定である。しかし、分割点の2乗に比例する記憶量が必要なので、分割点数は少ないことが極めて望ましい。

これら作用素の為の記憶量を減らす目的で、著者は、以下の多項式内挿法を導入した。

- 1) 作用素 H^i の情報は、区間 $[t_0, t_f]$ 上の粗い分割点上で記憶させる。
- 2) ベクトル函数 d^i 値を、 H^i の情報を記憶しているのと同じ点上で(5-5)により計算する。このとき、 g^i の値は H^i の記憶の為の粗な分割点上のものしか用いない。
- 3) (5-46)に挙げたものが記憶されている細い分割点上の d^i の値を、多項式内挿により求める。

- 4) d^i 方向への探索をして, u^{i+1} を求める。
 5) g^{i+1} と H^{i+1} の情報を計算し, ステップ 1) に戻る。
 適切な注意とある条件の下で, この多項式近似法は計算精度を余り犠牲にせずに, 多くの所要計算機記憶量を減らしうるであろう。

§6 最適制御への応用と計算例

Horwitz et al.⁴, Tokumaru et al.⁵ によって示された様に, この拡張された方法は, 最適制御問題に適用しうる。

最適制御問題を解くための定式化を, Lasdon et al.⁸, Tokumaru et al.⁵ の取扱に倣って, 簡単に述べる。

次の問題を考える。

$$J = \Phi(x(t_f)) \quad (5-47)$$

を, 次の条件下で最小とせよ。

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, t) \quad (5-48)$$

$$x(t_0) = c \quad (5-49)$$

ここに, x は m ベクトルであり, u は n ベクトルであるとする。また, t_0, t_f は一定とする。制御 u が与えられたとき, (5-48), (5-49) は一意な $x = x(u)$ について解かれ, 従って, $J = J(u)$ は u の函数であると仮定する。更に, 必要階数だけ連続微分可能な $J(u)$ のグラジエントベクトル $g(u)$ が存在するとする。

Hamiltonian H は次の様に定義される。

$$H = \sum_{j=1}^m p_j f_j \quad (5-50)$$

ここに, p は随伴 m ベクトル函数であって,

$$\frac{dp_j}{dt} = - \sum_{k=1}^m p_k \frac{\partial f_k}{\partial x_j}, \quad j = 1, \dots, m \quad (5-51)$$

$$p_j(t_f) = \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \Big|_{t=t_f}, \quad j = 1, \dots, m \quad (5-52)$$

グラジエントベクトルは,

$$g(u) = \frac{\partial H}{\partial u} \quad (5-53)$$

必要な階数連続微分可能な点 $u^0 = u^0(t)$ から探索を出発させる。i 回の探索において、ベクトル $u^{i-1} = u^{i-1}(t)$ は既知であり、グラジエントベクトル $g(u^{i-1}) = g^{i-1}$ は、(5-48), (5-49) を u^{i-1} について前向きに解き、(5-51), (5-52) を後向きに解くことにより、計算される。 g^{i-1} により、 d^{i-1} は $\delta 2$ または $\delta 3$ に与えられた定義から定まり、適当な 1 次元探索法により、 u^i が求められる。

函数空間における DFP 法と他の方法の収束の速さを較べる為、又、それ以上に、 $\delta 4$ において積分核を用いた表現から導かれた計算機構と $\delta 5$ の多項式内挿法が有効に適用できることを示す為、以下に数値計算例⁶を与える。

この例題においては、次に挙げる計算上の手法が用いられた。第 1 に、計算手順の安定性を保証する為、(5-8) の A^{i-1} 項の分母

$$\langle \sigma^{i-1}, \gamma^{i-1} \rangle \quad (5-54)$$

を次のものとおきかえる。

$$-\langle \sigma^{i-1}, g^{i-1} \rangle \quad (5-55)$$

これは、第 3 章 $\delta 3$ に述べた、1 次元探索が近似的にしか行いえないことに由来する DFP 法の数値上の不安定性を、同所における同じ考え方によって防ぐ為である。第 2 に、1 次元探索は、第 1 章 $\delta 5$ に述べた、バイナリー法(binary method)で行い、最小点を挟んだ後、3 次式内挿している。第 3 に、粗な分割点は、区間 $[t_0, t_f]$ を等間隔に分割する様にとり、密な分割点は、上の等分割された区間を更に等分割する様にとった。第 4 に、初回作用素 H^0 は次の積分核とした。

$$H^0(s, t) = h + b(s - t_0), \quad s \leq t \quad (5-56)$$

$$H^0(s, t) = h + b(s - t_0), \quad s > t \quad (5-57)$$

$$h = 1, \quad b = 1/(t_f - t_0) \quad (5-58)$$

次の例題を考えよう。これは、Merriam⁹, Lasdon et al.⁸ によっても解かれた最適制御問題である。

$$J = x_3(t_f) \quad (5-59)$$

を次の条件下で最小にせよ。

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = (1-x_2^2)x_1 - x_2 + u \\ \frac{dx_2}{dt} = x_1 \\ \frac{dx_3}{dt} = x_1^2 + x_2^2 + u \end{cases} \quad (5-60)$$

初期条件として,

$$x_1(t_0) = 0, \quad x_2(t_0) = 3, \quad x_3(t_0) = 0 \quad (5-61)$$

ただし, $t_0 = 0, \quad t_f = 10$

3つの方法, 即ち, DFP法, Fletcher & Reevesの方法¹⁰の函数空間への拡張であるところの Lasdon⁸の共軛勾配法, 最急降下法の3法によって計算したときの, 探索繰返し回数対汎函数値の関係をFig.5-1に与える。Fig.5-1の例では, 探索の出発点は $u^0 \equiv 0$ である。DFP法では, 密な分割は300個, 粗な分割は30個又は100個の分割された区間を持つようになされた。Fig.5-1において, 分割の粗さの収束の速さへの影響はあつかである。35回の繰返しの後にえられた u ベクトルの軌道がFig.5-2に与えてある。DFP法によって得られた最小値は21.417であった。

§7 検 討

本章に述べたDFP法の函数空間への拡張法について, 著者⁶の寄与は主に, 計算機を実際に使用して計算することを考えた際, DFP法が持つ計算機記憶量についての困難を克服することにある。この困難は有限次元空間における目的函数を対象としている間は, 現在の大型計算機の水準からして, 顕在化しないものであった。

Horwitz⁷は函数空間におけるDFP法の持つこの困難性を克服する為に, 区分的に一定な函数を導入することによって所要記憶量を減らし, 準最適解を得る方法を提出している。その方法は, Horwitzの掲げた例題⁷においては最適値の良い近似を与えている。そして, この区分的に一定な函数の導入という方法は, Horwitz自身の指摘する様⁷に, バンクバンク制御問題を解くのに適しているであろう。Horwitzのこの工夫はすぐれているが, 場合によっては, 準最適解ではなく, 精密な解が必要となることもある。

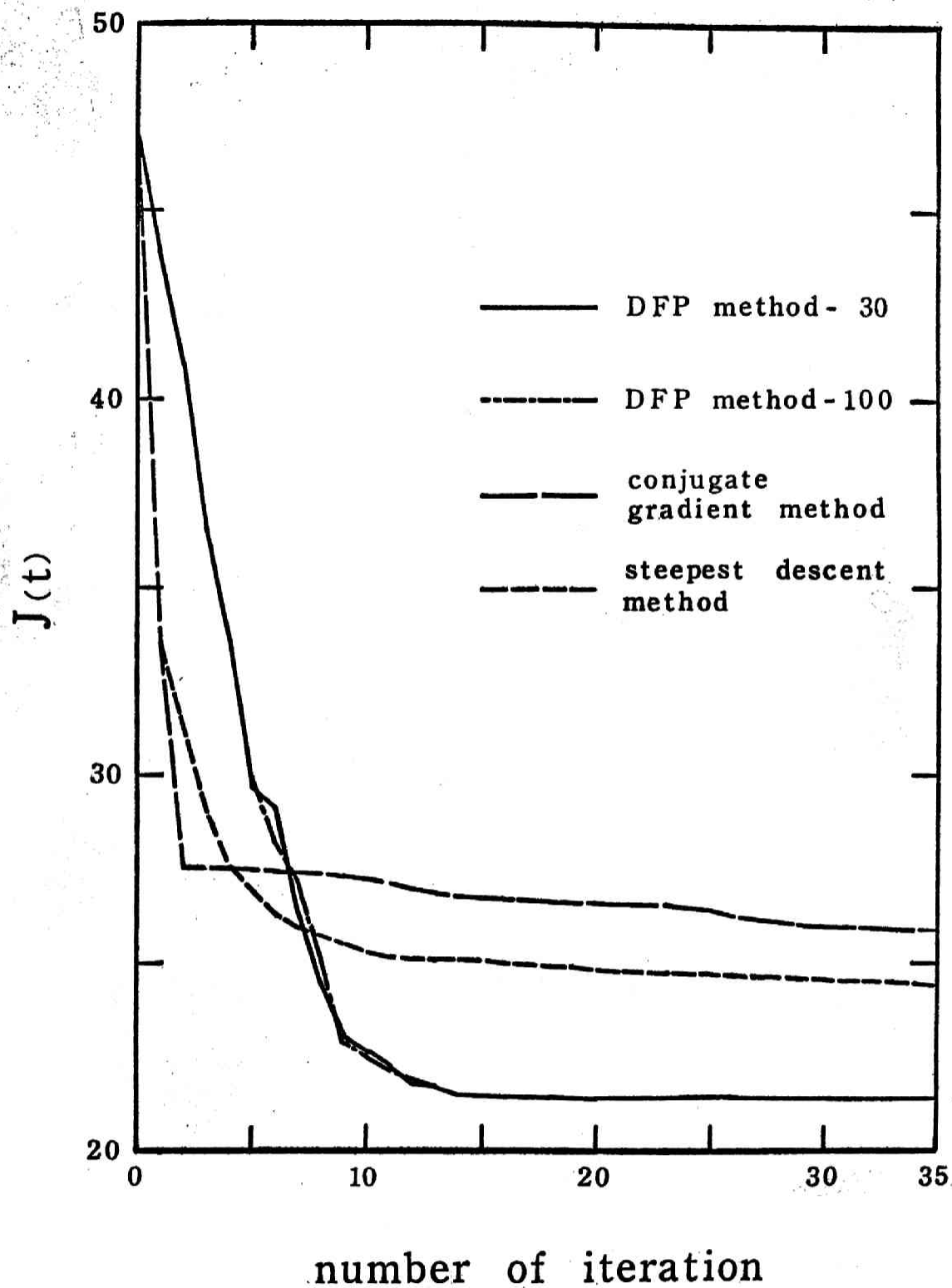


Fig. 5-1 Behaviour of the objective functional $J(u)$ computed by the DFP method with 30 and 100 coarse mesh points (DFP method-30 and DFP method-100, respectively), the conjugate gradient method, and the steepest descent method

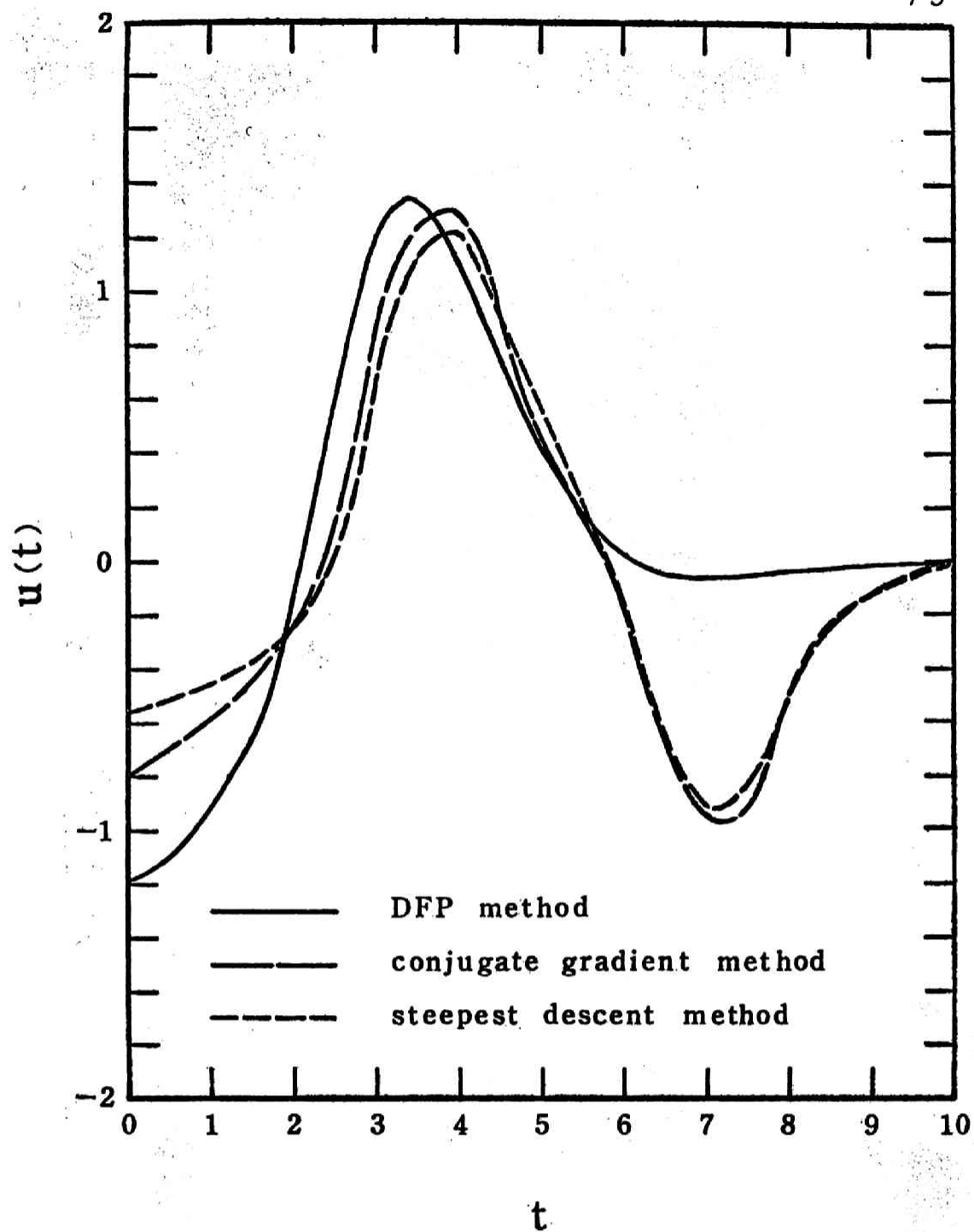


Fig. 5-2 Trajectories of the control $u(t)$ attained after 35 iterations by the DFP method, the conjugate gradient method, and the steepest descent method

そのような場合、あるいはDFP法によって解の充分近くに到達するために多くの探索繰返しを要する場合に、所要計算機記憶量が過大になるという困難を生ぜしめない為に、§4, §5において与えた著者による方法は有効である。§4において、著者は作用素 H^L の情報を記憶するための計算機記憶領域が、探索繰返し回数増加と共に増えるというDFP法の第1の困難性を除いた。さらに、§5では、いずれの計算機構によるにしても、 H^L の情報の記憶の為に、非常に多くの記憶が必要となるというもうひとつの困難を多項式内挿法により除いたのであった。この2つの方法の導入により、DFP法というすぐれた方法の函数空間への拡張理論が、実際の計算上にも有効に適用できるようになった。

DFP法は本来、束縛条件のない問題に対しての理論であるので、前節までに述べた方法はそのままでは束縛条件つき問題には適用できない。束縛条件つきの問題をDFP法によって解くためには、次章に与えるペナルティ函数法の一つたる Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) によればよい。Fiacco & McCormick¹¹によって有限次元空間について理論づけられたSUMTは函数空間については、Lasdon¹²によって拡張されている。このLasdonによるSUMTによれば、前節までに述べた方法によって束縛条件つきの問題を解くこともできる。

DFP法を束縛条件のある問題を解くのに用いるためには、ペナルティ函数法ばかりではなく、第1章第6節で言及したRosen¹³による方法の考え方を適用した、Goldfarb & Lapidus¹⁴による方法があるが、これについては考察しない。

DFP法の函数空間への拡張法が速く収束することを期待することは、この方法が共軛方向法のひとつであること、第II篇第5章その他³にもその例がみられるように有限次元空間の問題において成功していることから、当然ともいえる。しかし、同じく共軛方向法の一つたる共軛勾配法が、Lasdon et al.の与えた計算例⁸では最急降下法よりはるかにすぐれているにも拘らず、同じ例題で出発点の異なる§6の計算例ではFig. 5-1にみるように、最急降下法よりもさらにおそく収束している。

同じようなことが、本章の函数空間におけるDFP法を一般の非線型函数に適用したときに起きて、この方法が、最急降下法よりも劣る成績にとどまるかもしれない。実際、第II篇第7章において、管型反応器プロセスの最適制御問題を解くとき、そのような例が見出される。このようなことを考えると函数空間のDFP法の有効性の及ぶ範囲、適用の仕方などについて調べるため、多くの計算経験の蓄積が必要であろう。

また、DFP法の実用化の為に、細部について計算技法の工夫が必要であろう。

References

- 1 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 2 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, 163-168.
- 3 Box, M.J.: A comparison of several current optimization methods, and the use of transformations in constrained problems, Computer Journal, Vol.9, 1966, pp.67-77.
- 4 Horwitz, L.B., and Sarachik, P.E.: Davidon's method in Hilbert space, SIAM J. Appl. Math., Vol.16, 1968, pp.676-695.
- 5 Tokumaru, H., Adachi, N., and Goto, K.: Davidon's method for optimization problem in Hilbert space with an application to control problems, SIAM J. Control. Vol.8, 1970, pp.163-178.
- 6 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: Computational schemes of the Davidon-Fletcher-Powell method in infinite dimensional space, (未発表).
- 7 Horwitz, L.B.: An investigation of iteration techniques in function spaces and applications to optimal control problems, Doctoral Thesis, New York University, New York, 1968.
- 8 Lasdon, L.S., Mitter, S.K., and Waren, A.D.: The conjugate gradient method for optimal control problems, IEEE Transactions on Automatic Control, Vol.AC-12, 1967, pp.132-138.
- 9 Merriam III, C.W.: A computational method for feedback control optimization, Information and Control, Vol.8, 1965, pp.225-232.
- 10 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.

- 11 Fiacco,A.V., and McCormick,G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programing, a primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 12 Lasdon,L.S., Waren,A.D., and Rice,R.K.: An interior penalty method for inequality constrained optimal control problems, IEEE Transactions on Automatic Control, Vol.AC-12, 1967, pp.388-395.
- 13 Rosen,J,B.: The gradient projection method for nonlinear programming, Part.I. Linear constraints, Journal Soc. Indust. Appl. Math., Vol.8, 1960, pp.181-217.
- 14 Goldfarb,D., and Lapidus,L.: Conjugate gradient method for nonlinear programming problems with linear constraints, I&EC Fundamentals, Vol.7, 1968, pp.142-151.

第6章 Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)

§1 序

すでに述べた様に, Davidon-Fletcher-Powell法^{1,2}(DFP法)や共軛勾配法^{3,4}は, 束縛条件の存在しない問題に対して導き出されたものである。実際上の最適化問題では, 化学プロセスのそれによくみられるように, 束縛条件の存在するものが多いと考えられる。DFP法, 共軛勾配法などの共軛方向法は収束が速いこと, いいかえれば, 少ない計算量で最適解に到達することが, その利点なのであるから, 何等かの手段によって, この利点が束縛条件付きの問題を解く際に生かされることが望ましい。

第1章§6で述べた様に, グラジエント法によって最適化問題を解くときの束縛条件の処理の仕方は, 2つに大別される。第1のものは, Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)^{5,6,7}をもって代表されるペナルティ函数による方法である。第2のものは, 束縛曲面上での探索方向を求める方法である。

束縛面上で探索方向を求める方法については, 最急降下法を用いる場合についての, Rosen⁸, Zoutendijk⁹の方法に倣って, Goldfarb & Lapidus,¹⁰ Goldfarb¹¹が, DFP法を用いる場合の方法を与えた。

ペナルティ函数による方法の利点としては, 束縛条件を目的函数の中に組入れてから最適計算を行うので, 最適化法のプログラムに大きな変更の必要がなく, 目的函数の形が複雑になるだけですむこと, もっと重要なことは, たいいていの種類のグラジエント法と任意に組合せて用いることができること, といえよう。

第II篇において, 化学反応プロセスの不等号束縛条件付きの最適化問題を解く為に, 有限次元空間, 函数空間におけるSUMTによっているので, ここに, SUMTについて最小限の事項を述べる。

§2 有限次元空間におけるSUMT

最小化問題を次の形に与えるものとする。

$$\{ f(x) \}$$

$$(6-1)$$

を次の束縛条件の下で最小化せよ。

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, P \quad (6-2)$$

$$g_i(x) = 0, \quad i = P+1, \dots, P+q \quad (6-3)$$

$$P, q \geq 0$$

等号束縛条件(6-3)については、その処理法は直観的には早くから知られていた様である。即ち、収束の条件についての議論をさしおけば、正数 r_1 を適当に取って、(6-4)の函数を最小にして、 r_1 に対する最小点 $x^*(r_1)$ を得、しかるのち、 $r_2 > r_1$ なる r_2 について、 $x^*(r_1)$ を探索出発点として $P(x, r_2)$ を最小とする $x^*(r_2)$ を求める。以下同様にこの手順を繰返せばよいと考えられた。

$$P(x, r_1) = f(x) + r_1 \sum_{i=P+1}^{P+q} g_i^2(x), \quad r_1 > 0 \quad (6-4)$$

上式を考えるとき、 $P=0$ としている。

(6-2)の不等号束縛条件を処理するためのひとつの巧妙な方法として、Carroll¹²によって直観的意味づけと共に与えられた Created Responce Surface Technique がある。SUMTは、この方法を Fiacco & McCormick が理論的に精密化したものである。^{5,6}

Fiacco & McCormick⁵に従って SUMTの要点を述べる。

(6-1), (6-2), (6-3)において、 $q=0$ の問題、即ち、等号束縛条件の存在しない問題を考える。この問題に対し、次の函数を定義する。

$$P(x, r_1) = f(x) + r_1 \sum_{i=1}^P \frac{1}{g_i(x)} \quad (6-5)$$

R° に属する点 x_0 から出発して、(6-5)の函数を最小にする点 $x^*(r_1)$ を求める。

$$R^\circ = \{x \mid g_i > 0, \quad i = 1, \dots, P\} \quad (6-6)$$

次に新たに函数

$$P(x, r_2) = f(x) + r_2 \sum_{i=1}^P \frac{1}{g_i(x)}, \quad 0 < r_2 < r_1 \quad (6-7)$$

を取り、 $x^*(r_1)$ から出発して、(6-7)の最小点を求める。

同様の手順を繰返して、点列

$$\{x(r_k)\}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6-8)$$

をそれぞれの $P(x, r_k)$, $k = 1, 2, \dots$ に対して求める。ここで、 r_k は k が大

となるに従ってゼロに単調に近づく様にする。ある条件が満たされたとき、 $x^*(r_k)$ は $k \rightarrow \infty$ となるとき、真の解 v_0 に収束する。

Fiacco & McCormick⁵はこの手順について、収束の条件は次の条件1, 条件2であることを示した。

条件1: (6-1), (6-2)で与えられる問題に解 v_0 が存在すること。

条件2: 函数

$$P(x, r) = f(x) + r \sum_{i=1}^P \frac{1}{g_i(x)} \quad (6-9)$$

がすべての $r > 0$ に対して $x \in R^\circ$ なる x について狭義の凸函数となる。

この条件1, 2が満たされるとき, (a), (b)が得られる。

(a) 函数 $P(x, r_k)$ は R° 上の唯一の点 $x^*(r_k)$ 上で最小となり, 次式がなりたつ

$$\nabla_x P(x^*(r_k), r_k) = 0 \quad (6-10)$$

(b)

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} P(x^*(r_k), r_k) &= \min_{x \in R} f(x) \\ &= v_0 \end{aligned} \quad (6-11)$$

ここに

$$R = \{x \mid g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, P\} \quad (6-12)$$

R は R° の閉包である。

上の(b)が解 v_0 への収束性であり, (a)が解 v_0 の唯一性を与えている。

条件1がなりたつためには, 次の3つの条件が満たされればよい。条件1-1; R° が空でない。条件1-2; $f, g_i, i = 1, \dots, P$ が2階連続微分可能。条件1-3; 有限な k に対し, $\{x \mid f(x) \leq k; x \in R\}$ が有界集合であること。

条件2が成立つためには, $f(x)$ が凸, $g_i(x), i = 1, \dots, P$ が凹であればよい。

Fiacco & McCormick⁵は更に, (6-1), (6-2)で与えられる問題の双対問題を検討した。双対問題は次の様である。

$$G(x, u) = f(x) - \sum_{i=1}^P u_i g_i(x) \quad (6-13)$$

を次の(6-14), (6-15)なる束縛条件の下で最小化せよ。

$$\begin{cases} \nabla_x G(x, u) = 0 \end{cases} \quad (6-14)$$

$$\begin{cases} u_i \geq 0 \end{cases} \quad (6-15)$$

$x^*(r_k)$ を $P(x, r_k)$ が最小となる点とし,

$$u_i(r_k) = r_k / g_i^2(x^*(r_k)) \quad (6-16)$$

とおくとき, $\{x^*(r_k), u(r_k)\}$ は (6-14), (6-15) なる束縛条件を満たし, 次の関係がなりたつ。

$$G\{x^*(r_k), u(r_k)\} \leq v_0 \quad (6-17)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} G\{x^*(r_k), u(r_k)\} = v_0 \quad (6-18)$$

(6-11), (6-18) をして, (6-17) によって, r_k に対して

$$P(x^*(r_k), r_k) - G\{x^*(r_k), u(r_k)\} \geq 0 \quad (6-19)$$

が, 得られた最小の $f(x)$ の値と真の最小値 v_0 との差

$$f(x^*(r_k)) - v_0 > 0 \quad (6-20)$$

の上限を与える。

この双対問題は SUMT による r_i 値減少の繰返しの終止の規準を与える。即ち, (6-20) が或る値より小になる点 x が求められれば実用上の目的を達する最小点が得られたとすることが出来る。この規準は第1章 §8 に言う探索の終止規準とは異った意味のものであるが, r_i 値減少を不必要に繰返すことを避けるための良い規準である。

さて, プロセス最適化, その他實際上生じる束縛条件つき最小化問題を解くために, SUMT を適用するとき, 第1に問題となるのは, 条件 1-1 ~ 1-3 が満たされなかったり, 満たされるか否かの判別が困難であったりすることである。また, $f(x)$ の凸性が満たされなかったり, 証明しえなかったりすることもある。例えば, 第II篇第6章で解く, 多段反応槽列についての最小化問題では, 束縛条件のとり方によっては, $f(x)$ は凸ではなくなる。しかしながら, Carroll¹² の与えた直観的な SUMT の解釈によれば, これらの条件が必ずしも満たされない問題に対しても, SUMT はかなり有効と思われる。実際, 上にふれた最小化問題において, 目的函数 $f(x)$ が凸でない場合も, SUMT の適用法によつては, 最小点を求めることができることは, 第II篇第6章に述べる。それ故, SUMT において, 収束の条件が満たされないからといって, その適用を直ちに放棄すべきものではないと考えられる。

§3 函数空間へ拡張された SUMT

DFP法, 共軛勾配法が函数空間に拡張された様に, 前節の Fiacco & McCormick^{5,6} の SUMT も最適制御問題を解く為に, Lasdon, Waren, & Rice⁷ によって函数空間へ拡張された。この SUMT の函数空間への拡張によって, DFP法, 共軛勾配法が函数空間における不等号束縛条件つき問題を解くために適用しうることになる。

第Ⅱ篇で用いる必要上, 以下に Lasdon et al.⁷ の記述に従って, SUMT の函数空間への拡張法を与える。

次の問題を考える。

$$\phi(x_f, t_f) \quad (6-21)$$

を下の条件下に最小化する。

$$\dot{x}(t) = f(x, u, t) \quad (6-22)$$

$$x(t_0) = c \quad (6-23)$$

$$h(x_f, t_f) = 0 \quad (6-24)$$

$$g(x, u, t) \geq 0 \quad (6-25)$$

ここに x は n ベクトルで, $x_f \equiv x(t_f)$ 。 t_f は (6-24) より x_f から定まる。また, m ベクトルの制御 u が与えられたなら, (6-22) と (6-23) は $x = x(u)$ なる一意の解を与えるとする。また, h は r ベクトル, g は s ベクトルとする。

かくして, 束縛 $g_i(x(u), u, t)$ は $g_i(u, t)$ と書くことができ, 目的函数 $\phi(x_f, t_f)$ は $\phi(u)$ と書くこともできる。

前節と同様に次の函数をおく。

$$P(u, r_k) = \phi(x_f, t_f) + r_k \sum_{i=1}^s \int_{t_0}^{t_f} \frac{dt}{g_i(x, u, t)}, \quad r_k > 0 \quad (6-26)$$

S に属する u をとって, $r_1 > 0$ として, (6-22), (6-23), (6-24) の下で (6-26) を最小化し, その最小点を $u(r_1)$ とする。ただし, S は u によって定まる x と共に次の i), ii) を満たす全ての操作変数 u である。

i) $x(t_f) \in G(t_f)$ なるような $t_f < \infty$ が存在し, $t_0 \leq t < t_f$ に対し, $x(t) \in G(t)$

ii) $g_i(x, u, t) \geq 0$, $t_0 \leq t \leq t_f$, $i = 1, \dots, s$ 。ただし,

$$G(t) = \{x(t) \mid h(x(t), t) = 0\} \quad (6-27)$$

そして、前節と同様に、 $r_1 > r_2 > \dots > r_k > 0$ なる列について、 $u(r_k)$ を求める、適当な条件の下で、 $k \rightarrow \infty$ となって $r_k \rightarrow 0$ となるとき、 $u(r_k) \rightarrow u^*$ となる。ここに、 u^* は、はじめに考えていた問題の解である。

References

- 1 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 2 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 3 Hestenes, M.R., and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol.49, 1952, pp.409-436.
- 4 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.
- 5 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, A primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 6 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: Computational algorithm for the sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, Management Science, Vol.10, 1964, pp.601-617.
- 7 Lasdon, L.S., Waren, A.D., and Rice, R.K.: An interior penalty method for inequality constrained optimal control problems, IEEE Transactions on Automatic Control, Vol.AC-12, 1967, pp.388-395.
- 8 Rosen, J.B.: The gradient projection method for nonlinear programming, Part.I. Linear constraints, Journal Soc. Indust. Appl. Math., Vol.8, 1960, pp.181-217.
- 9 Zoutendijk, G.: Methods of feasible directions A study in linear and non-linear programming, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1960, 123p.
- 10 Goldfarb, D., and Lapidus, L.: Conjugate gradient method for

nonlinear programming problems with linear constraints, I&EC Fundamentals, Vol.7, 1968, pp.142-151.

- 11 Goldfarb, D.: Extension of Davidon's variable metric method to maximization under linear inequality and equality constraints, SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol.17, 1969, pp.739-764.
- 12 Carroll, C.W.: The created response surface technique for optimizing nonlinear, restrained systems, Operations Research, Vol.9, 1961, pp.169-184.

Nomenclature for Part I

Symbols that appear infrequently and in one section are not listed.

- A : positive-definite, symmetric matrix.
- A^i : one of the linear operators which define linear operator H^{i+1} by $H^i + A^i + B^i$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- A_k^{i-1} : matrix of the integral kernels $A_{lm}^{i-1}(s, t)$.
- B^i : one of the linear operators which define linear operator H^{i+1} by $H^i + A^i + B^i$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- B_k^{i-1} : matrix of the integral kernels $B_{lm}^{i-1}(s, t)$.
- E_i : activation energy of chemical reaction.
- $F(x)$: $f(x) - f(x^*)$.
- $F_l(x)$: $f(x) - f(x^l)$.
- $F_s(x)$: $\frac{1}{2}(x - x^*)^T (H^l)^{-1} (x - x^*)$.
- $F_0(x)$: $f_0(x) - f(x^*)$.
- H^i : linear operator which defines one-dimensional search direction of $i+1$ th iteration by $H^i g^i$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- H^l : linear operator which defines one-dimensional search direction after the point x^l is attained.
- H_k^0 : matrix of integral kernels $H_{lm}^0(s, t)$.
- $J(u)$: functional.

- N : the prescribed number of total iterations for one-dimensional search.
- $P(x,r)$: penalty function.
- R : gas constant.
- V : orthogonal matrix of eigenvectors, $(v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n)$.
- a : starting point of one-dimensional search interval for which the function value is known at the outset, only in Chapter 2.
- b : one of the terminal points of one-dimensional search interval in the opposite side of point a , only in Chapter 2.
- d^i : one-dimensional search direction in i -th iteration.
- f_{xx} : Hessian matrix of function $f(x)$ for the local minimum point x^* .
- $f(x)$: nonlinear objective function.
- $f_0(x)$: $f(x^*) + \frac{1}{2}(x-x^*)^T f_{xx}(x-x^*)$.
- f^* : value of $f(x)$ for the local optimum point x^* .
- $g(x^i)$: gradient vector of the objective function for x^i .
- $k_{\omega i}$: frequency factor of chemical reaction.
- n : the number of iterations in the manner proper to the ordinary one-dimensional search, only in Chapter 2.
- m : the number of iterations in the manner proper to the modified one-dimensional search, only in Chapter 2.

- p : point where the function value is equal to that of the starting point in one-dimensional search, $f(p)=f(a)$.
- $q(x)$: quadratic objective function.
- r^i : residual of linear simultaneous equation in $i+1$ th iteration.
- r_i : weighting value of penalty function.
- u^i : control vector attained in i th iteration.
- u_j : Fibonacci number, $u_{j+2}=u_{j+1}+u_j$, $u_1=u_2=1$.
- v_j : eigenvector of matrix corresponding to the eigenvalue λ_j .
- x^i : point attained in i th iteration.
- x^l : point in the vicinity of the local minimum x^* attained in l th iteration.
- x^1 : one of the search points in the interval $[x^*, x^{**}]$ nearer to x^* , only in Chapter 2.
- x^2 : one of the search points in the interval $[x^*, x^{**}]$ nearer to x^{**} , only in Chapter 2.
- x^* : local optimum point, except in Chapter 2.
- x^* : one of the terminal points of the current one-dimensional search interval nearer to the starting point of the search, only in Chapter 2.
- x^{**} : one of the terminal points of the current one-dimensional search interval farther from the starting point of the search, only in Chapter 2.
- α : parameter of one-dimensional search.

α_{\min} : α which minimizes the function $f(x+\alpha d)$ in one-dimensional search, for some x and d .

γ^{i-1} : $g^i - g^{i-1}$, (Davidon-Fletcher-Powell method).

λ_j : eigenvalue of matrix.

ρ : price ratio.

σ^{i-1} : $x^i - x^{i-1}$ or $u^i - u^{i-1}$, (Davidon-Fletcher-Powell method).

τ : the larger root of the equation $t^2 - t - 1 = 0$, $(1+\sqrt{5})/2$.

Superscripts

T : matrix transposition.

0 : starting point of iterative search procedure.

第 II 篇

プロセス最適化問題の解析と最適化計算

第1章 序 章

§1 第Ⅱ篇の意図と第Ⅰ篇との関係

第Ⅱ篇では、第Ⅰ篇で著者による方法として提出し、あるいは検討したグラジエント法とそれに関連した計算法とを化学プロセスの最適化問題に適用する。

グラジエント法の適用によって、プロセス最適化への適用方法の検討、計算結果による計算方法の優劣の比較が行われる。これらは、第Ⅰ篇で論じたところのグラジエント法をプロセス最適化研究遂行に有効に役立たせる方法を明らかにするために行われるものである。グラジエント法に関連した計算法としては、第Ⅰ篇第4章において与えた、著者による感度解析法も含まれる。第Ⅱ篇に掲げる適用例によって、感度解析法のプロセス最適化問題研究における有効さが、より容易に理解されよう。

第Ⅱ篇のもうひとつの重要な論点はプロセス最適化問題の解析である。この解析は多段抽出プロセスの最適化問題の数学的性質、図形的意味づけと、最適化問題の多峰性の解析とに大別される。これらの問題、特に後者の議論は数値的方法によるプロセスの最適化の結果に基づいたものであり、Davidon-Fletcher-Powell法(DFP法)の有効性をもって実行しえたものである。

本論文では、このような検討のために必要な手段としてのグラジエント法の研究結果を、第Ⅰ篇で述べたわけである。

第Ⅱ篇で行う研究の対象とされたプロセスは、多段十字流抽出プロセスと、多段および管型反応プロセスとである。各プロセスについて、どのような研究がなされるかの概略と研究相互の関係を、それぞれ、§2, §3に述べる。

第Ⅱ篇第2章から第7章に述べることは主として著者の研究に基づいたものである。

§2 多段十字流抽出プロセスの最適化問題に関する研究について

第Ⅱ篇第2章から第5章まででは、多段十字流抽出プロセスの同一の最適化問題のいくつかの点につき論じるが、これらの章は第Ⅱ篇の主要な部分となっている。

ここで論ずる抽出プロセスの最適制御問題については、数学的解法の適用の

可能性, 適用法, 解法の有効性等の見地からの検討はすでに古くから行われていた。本論文でも第5章においてそのような見地からの検討をも行うが, 主たる論点は以下に述べるものである。これらの論点について, 数値計算法による解に基づいて議論が行われることもあるが, 数値計算法に関する事項は, 感度解析のための計算に関するもの以外, すべて第5章にまとめる。

主たる論点の第1は, この抽出プロセスの最適制御問題の持つ性質の数学的な意味を明らかにして, これを更に図形的に表わして, 直観的に問題の意味を明らかにすることである。これは第2章で論じられる。この様な議論は一見数値計算法と関係のないことのように思われるが, 数値計算結果の意味づけをなし, 計算結果の理論的根拠を与えるものになる。また, 本章の議論は数値計算結果に対する洞察から推測されたことを検討することによって促進されたものである。

第2の論点は, この抽出プロセス最適化問題が見せる目的函数の多峰性を系統的に調べ, 多峰性の生じ方の傾向を明らかにし, 又, その傾向の生じる原因を第1の論点と関連させて考察することである。これは第3章に与える。

第3の論点は, 第I篇第4章に与えられた, DFP法の著者による拡張によって得られた感度解析法を, 本プロセス最適化問題に適用することに關している。この適用例において, 感度解析法は良い成績を収めたが, プロセスの応用例としてだけでなく, 新しい数値計算方法の試験という意味も含めて述べられる。これは第4章に与える。

第5章においては, この最適化問題を解く為の数値的方法について, DFP法を中心として論じる。この章において述べることで, 第4章における感度解析法に関する議論から, プロセスの最適化問題の解析をするために, 数値計算法の適切な選択, あるいは, より有効なものの開発が必要とことが知られるであろう。

§3 多段及び管型反応器プロセスの最適化に関する研究について

本篇第6章と第7章では, 逐次反応を行う反応器系の最適温度分布を求める問題を扱う。反応温度には, 上限及び下限からなる束縛条件が課せられているものとする。

第6章では, 多段の問題を, 第7章では管型反応器の場合を扱う。いずれの章でも, 束縛条件の処理は第I篇第6章の Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) によっており, それぞれ, 第6章§2の有限次元空間における SUMT, 同§3の函数空間に拡張された SUMT

によっている。SUMTによって束縛条件のない問題に転換された目的函数の最適点を求める為のグラジエント法としては、第6章ではNewton法と最急降下法が用いられ、第7章では、第5章のDFP法の函数空間への拡張によっている。

両章において、最適化計算の技法、特性、問題点、特に探索の繰返し回数と最適解への接近について述べる。

第7章では、DFP法の有効である条件についても、計算結果を元にして述べられている。

第2章 多段十字流抽出プロセスの最適化問題 の数学的, 図形的性質

§1 系のモデルと最適化問題

第2章から第5章までで取り上げる多段十字流プロセスの最適化問題は, Dynamic Programmingが適用できることを示すために, Aris, Rudd & Amundson¹によって与えられたものである。このモデルについては, 後述する目的函数の形とも相俟って, 本章で論ずる様に, 最適化問題に対する明快な解釈が得られる。

取上げたプロセスを図式化したものを, Fig. 2-1に掲げる。このプロセスにおいて, 抽出して得るべき溶質を濃度 x_+ だけ含んだ原料溶媒を第1溶媒とし, 流量 q で第1段へ供給する。以下, 第 $i-1$ 段から流出する濃度 x_{i-1} なる溶質を含んだ第1溶媒が, 流量 q で第 i 段に送り込まれる。最終段第 n 段を流出した流量 q , 溶質濃度 $x_n > 0$ の第1溶媒は廃棄される。(Fig. 2-1において, $r > 0$, 即ち, リサイクルを有する場合については後述する。)下に述べる様に, 各段で溶質は第2溶媒に抽出されるので, $x_{i-1} > x_i$ である。よって,

$$x_n < x_{n-1} < \cdots < x_i < x_{i-1} < \cdots < x_1 < x_0. \quad (2-1)$$

一方, 目的とする溶質を抽出する為に, 第2溶媒として, 溶質濃度ゼロのものを第 i 段に流量 w_i ずつ送りこむ($i=1, 2, \cdots, n$)。この第2溶媒は, 第1溶媒中に存在する溶質のうちのなにがしかの量を抽出して, 濃度 w_i の溶質を含んで, i 段を去る。

本プロセスにおいては, 各段において, 第1溶媒と第2溶媒が混じり合わない(immiscible)ものとしている。この仮定により, 第1溶媒と第2溶媒とのそれぞれの流れは, 各段において別々に流入し, 流出することとなる。そして, 各段において, 溶質のみが第1溶媒から第2溶媒へ移動する。

よって, 第 i 段における溶質の物質収支は, $x_f = x_0$ として, 次の式で与えられる。

$$w_i w_i = q(x_{i-1} - x_i), \quad 1 \leq i \leq n \quad (2-2)$$

このときの溶質の移動量は, 平衡関係式

$$w = \phi(x) \quad (2-3)$$

によって規定されるとする。即ち, 各段において, 第1溶媒と第2溶媒との間に平衡関係が成立するとする。ただし, ここで函数 $\phi(x)$ は2階以上連続微分

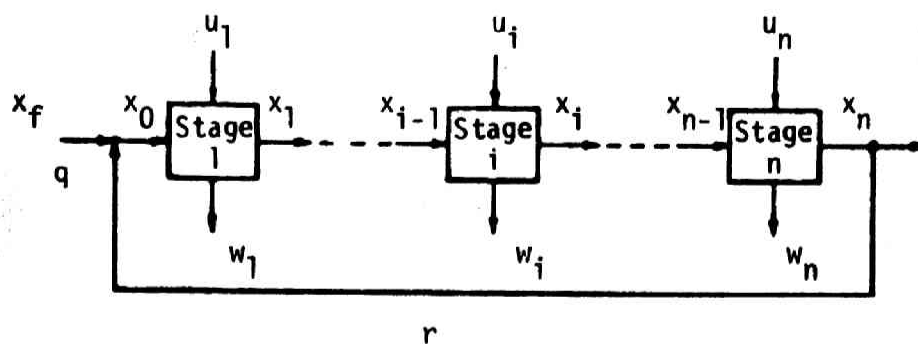


Fig. 2-1 Schematic diagram of the multistage cross-current extraction process

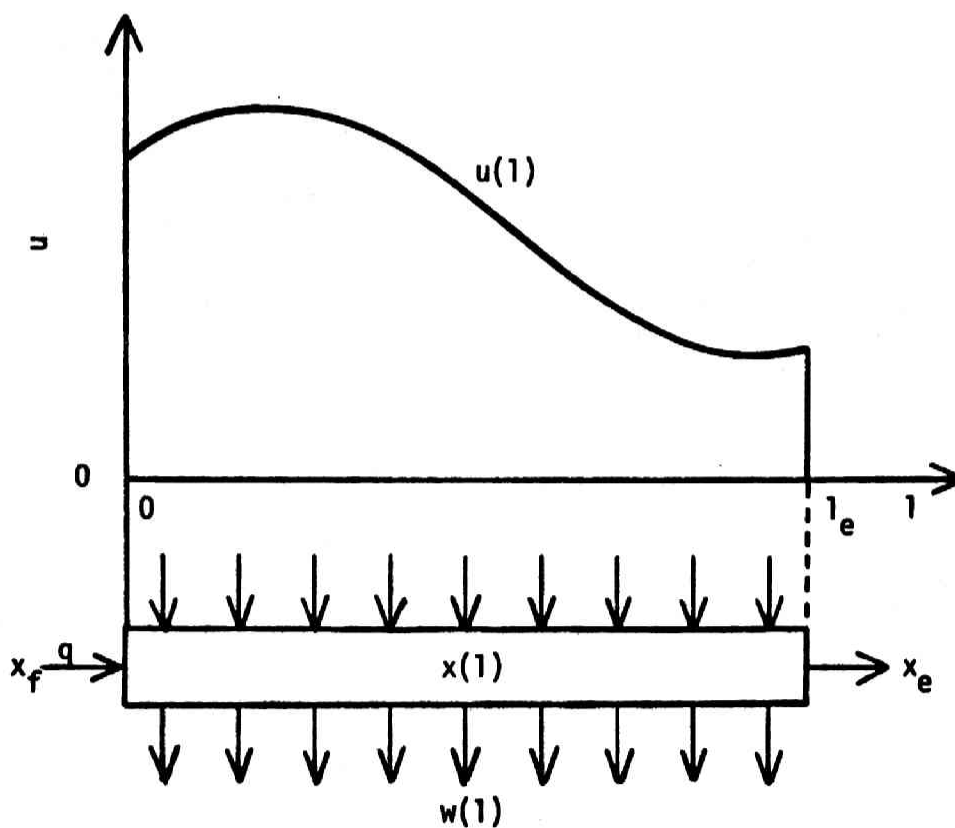


Fig. 2-2 Schematic diagram of the continuous cross-current extraction process

可能にして狭義の単調増加非負函数とする。平衡関係がなりたつという仮定は、系のモデルを簡略化したことになる。これと対照的に、第6章で論じる多段反応槽列の最適制御問題においては、この仮定は用いられていない。平衡関係がなりたつという仮定が、本章の議論でいかなる意味を持ってくるか、多段プロセスという意味では類似の系である多段抽出プロセスと多段反応槽列プロセスの最適制御問題にどのような相違を生ぜしめるか、プロセスモデルにおける仮定の意義として、興味ある問題である。

第5章において、このプロセスがリサイクルを有する場合について言及するが、これは系の第 n 段から出る第1溶媒流の一部を流量 $r(>0)$ だけ第1段に返送して、原料と共に第1段目に流入させる系である。(Fig. 2-1) よって、リサイクルがあるとき、第 i 段($1 \leq i \leq n$)を通過する第1溶媒流量は $q+r$ である。

次にこの抽出プロセスの最適化問題を考察しよう。最適化の目的は、この系から単位時間にできるだけ多くの利益をあげることであるとする。

第6章における逐次反応を行う反応槽列の最適制御問題においては、最適温度分布決定の為に目的生成物量、あるいは価格比を考慮した未反応物質と生成物の量の和を最大とする目的函数がとられる。しかし、ここでの抽出プロセスでは、反応槽列における目的函数と類似に第2溶媒へ移動する溶質総量を取ることは無意味である。何故なら、平衡関係がなりたつという仮定から、第2溶媒の量を増加せしめれば、得られる溶質も単調に増加するからである。この事情は、 $A \rightarrow B$ 型不可逆反応において、Arrhenius型の反応速度式を仮定すると、生成物量を最大にするためには反応槽温度を無限大にすればよいことに、ある程度類似している。

よって、ここでの抽出プロセスでは、目的函数を設定するにあたり、第2溶媒の価格をも考慮に入れる。溶質と第2溶媒との価格比 ρ を次の様に定義する。

$$\frac{\text{第2溶媒の価格}}{\text{溶質の価格}} = \rho \quad (2-4)$$

ここでは、目的函数として、単位時間当りにこの系から得られる利益 P をとる。

$$\begin{aligned} P &= (\text{得られた溶質の価格}) - (\text{使用された第2溶媒の価格}) \\ &= q(x_0 - x_n) - \rho \sum_{i=1}^n u_i \end{aligned} \quad (2-5)$$

ただし、次のようにおいている。

$$x_0 = x_f \quad (2-6)$$

リサイクルを有する場合も含めれば,

$$P = (q+r)(x_0 - x_n) - p \sum_{i=1}^n u_i \quad (2-7)$$

ただしこのとき

$$x_0 = \frac{qx_f + rx_n}{q+r} \quad (2-8)$$

また, (2-2)は次式によりおきかえられる。

$$w_i u_i = (q+r)(x_{i-1} - x_i), \quad 1 \leq i \leq n \quad (2-9)$$

(2-7) ~ (2-9)は $r=0$ とおけば明らかに, (2-5), (2-6), (2-2)に帰着する。

後に図形的に明確にすることであるが, (2-5)を目的函数として取るとき, P の最大値は n を大にするに従って単調に増加する。よって, この最適化問題は段数 n が一定の場合にのみ意味がある。即ち, 抽出プロセス建設の際の段数決定の設計問題を考えるときは無意味である。このような問題については, 段の建設費なども考慮した目的函数をとらなければならない。

リサイクルのある場合も含んだ一般的な式(2-7)を第1溶媒の溶質濃度 x のみについての式に書きかえる。(2-9)と(2-3)より,

$$u_i = (q+r) \frac{x_{i-1} - x_i}{\phi(x_i)} \quad (2-10)$$

これを(2-7)に代入して, 右辺第1項を $x_{i-1} - x_i$ の和をもって書きかえれば

$$P = (q+r) \sum_{i=1}^n (x_{i-1} - x_i) \left(1 - \frac{p}{\phi(x_i)}\right) \quad (2-11)$$

§2 状態変数についての最適化

ここでの最適化問題においては, 操作変数として取るべきものは, 各段の第2溶媒流量 u_i ($i=1, 2, \dots, n$)であり, x_i は状態変数である。

しかし, Lee²が行ったように u_i ($i=1, \dots, n$)を操作変数として計算することは, (2-3)の逆函数

$$x = \phi^{-1}(w) \quad (2-12)$$

が知られていないとき, w_i について(2-3)を各段で解かなければならず, 又, リサイクルを考慮したとき, 物質収支式(2-8)をも解かなければならない。これらは, 繰返しによる繁雑な計算を必要とする。

P を u_i について最大化するための必要条件は

$$\frac{\partial P}{\partial u_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial P}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial u_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2-13)$$

しかるに, (2-13)が成立つなら次式が成立つこと, 又, その逆が容易に証明できるので³, 本論文においては, 第1溶媒中の溶質濃度 x_i , ($i=1, \dots, n$) について, P の最大値を求める。こうすることにより, 計算は簡単になり, 計算量も減少する。

$$\frac{\partial P}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2-14)$$

§3 連続系への拡張

前々節で与えた多段プロセスの連続系への拡張を考える。この拡張は Aris et al.¹ によっても考察されたものであるが, ここでは異った見地から検討する。Aris et al.¹ も指摘している様に, この拡張された連続系は仮想的なものである。

原料の入口の位置を $l=0$, 出口の入口からの距離を $l=l_e$ とする。(Fig. 2-2) そして, $0 \leq l \leq l_e$ なるすべての点において $u(l)$ なる流量の第2溶媒が第1溶媒の流れに流入し, 同じ点 l において濃度 $w(l)$ の溶質を含んで第1溶媒と分離する。ここに, $u(l)$ は $0 \leq l \leq l_e$ において正かつ1階連続微分可能とする。

点 l における第1溶媒, 第2溶媒の溶質濃度は(2-3)と同一の平衡関係式によって規定されるものとする。ただし, $x(l)$ は連続函数であって, 函数 $\phi(x)$ は §1 と同じく, x について狭義の単調増加連続函数とする。

$$w(l) = \phi(x(l)) > 0 \quad (2-15)$$

点 l においては, (2-2)と類似な物質収支式がなりたつ。

$$w(l)u(l) = -q \frac{dx}{dl} \quad (2-16)$$

$0 \leq l \leq l_e$ において, $w(l)$, $u(l)$, q はすべて正なので, $x(l)$ は単調減少函数であって, 逆函数 $x^{-1}(x) = l(x)$ が存在する。更に, 上にみた様に $x(l)$ が微分可能であるので, $l(x)$ も又微分可能であって,

$$\frac{dx}{dl} \frac{dl}{dx} = 1 \quad (2-17)$$

よって, (2-16)より,

$$\frac{dl}{dx} = - \frac{q}{w(l(x))u(l(x))} \quad (2-18)$$

x_e を次の様に定義する。

$$x_e = x(l_e) \quad (2-19)$$

抽出操作によって得られる総溶質量は, リサイクル流をいま考慮していないので,

$$q(x_f - x_e) \quad (2-20)$$

また, これに要する第2溶媒総量は

$$U = \int_0^{l_e} u(l) dl \quad (2-21)$$

よって, 系から得られる利益は単位時間当り

$$P = q(x_f - x_e) - p \int_0^{l_e} u(l) dl \quad (2-22)$$

(2-16)による変数変換と(2-15)とによって,

$$\begin{aligned} P &= q(x_f - x_e) - p \int_{x_f}^{x_e} \frac{q}{w(l(x))} dx \\ &= q \int_{x_f}^{x_e} \left(1 - \frac{p}{w(l(x))} \right) dx \\ &= q p \int_{x_f}^{x_e} \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{\phi(x)} \right) dx \end{aligned} \quad (2-23)$$

q, p 一定の下で P を最大とすることが問題なのであるから,

$$p - \phi(x) = 0 \quad (2-24)$$

の根を x_p とし,

$$\frac{1}{p} - \frac{1}{\phi(x_f)} > 0 \quad (2-25)$$

なるとき,

$$\begin{aligned} P &= qp \int_{x_e}^{x_f} \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{\phi(x)} \right) dx \\ &\leq qp \int_{x_p}^{x_f} \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{\phi(x)} \right) dx \end{aligned} \quad (2-26)$$

等号がなりたつのは

$$x_e = x_p \quad (2-27)$$

のときであって, それ以外のときは, (2-26) の不等号がなりたつ。

よって, 連続系においては, 出口濃度 x_e が x_p に等しいときに, 目的函数が最大となる。このとき, (2-16) と (2-15) より

$$\int_0^{l_e} u(l) dl = q \int_{x_e}^{x_f} \frac{dx}{\phi(x)}, \quad x_e = x_p \quad (2-28)$$

これが, P 最大となるとき第2溶媒の総量であり, 任意に取った $l_e > 0$ に対してこの関係を満足しさえすれば, $u(l)$ の分布はさきに述べた仮定のもと, いかなるものであってもよい。

即ち, 連続系について最適な抽出操作をなすには,

i) 溶質の価格と第2溶媒の価格が釣合ったところで抽出操作を打切ればよい。釣合ったところは,

$$\begin{aligned} p &= \phi(x_p) \\ &= w_p \end{aligned} \quad (2-29)$$

および(2-4)により明らかになる。

ii) l に対する最適操作 $u(l)$ は, その分布に関係せず, l についての積分値のみに関係する。多段系における最適操作 u_i , $i=1, \dots, n$ について後述するが, 連続系と異り, 分布は任意ではない。

iii) 任意の x (x_e) に達するまでの, u の消費量は, 最適操作であるなしに拘らず, 一意である。(2-15), (2-16) から

$$\int_0^l u(l) dl = q \int_{x_f}^x \frac{dx}{\phi(x)} \quad (2-30)$$

iv) 管長 l_e は q の値をどのように取っても最適操作に関係しない。このことは, 多段系において各段槽容積が最適操作に無関係なることと類似している。

§4 多段系の目的函数式の連続系のものへの類似

$x_e = x_p$ として, 連続系の目的函数の最大値は,

$$P = q \rho \int_{x_p}^{x_f} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\phi(x)} \right) dx \quad (2-31)$$

多段系の目的函数(2-11)を(2-31)と類似の形に書きかえる。

$$x_{n+1} = x_p \quad (2-32)$$

なる変数を形式的に導入し, また, $r=0$ (リサイクルなし) としていることから,

$$P = q \rho \sum_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\phi(x_i)} \right) (x_{i-1} - x_i) \quad (2-33)$$

原問題では物理的意味から濃度に不等号束縛条件(2-1)が課せられているとしたが, ここでは, 目的函数の性質上最適解においては $x_n > x_p$ となることは明らかなので, (2-1)の条件をより強くして,

$$x_p < x_n < x_{n-1} < \cdots < x_2 < x_1 < x_0 \quad (2-34)$$

としている。(2-34)の束縛条件の下では, 原最適化問題は, それより段数が1段多く, 最終段出口濃度を x_p とするという条件の附加された最適化問題に等しい。

§5 目的函数の性質の図形的解釈

$x_e = x_p = x_{n+1}$ とする。連続系の場合、目的函数が最大値をとるとき、その値が図形的にいかに関係されるかを考えると、高さ $1/p$ の直線の下、 $1/\phi(x)$ なる曲線の上、 $x_p \leq x \leq x_f$ の区間の面積に qP (一定値) を乗じたものである。

多段系については、区間 $[x_e, x_f]$ を x_k , $k=1, \dots, n$ ($x_{k+1} < x_k$) によって $n+1$ 分割し、各区間 $[x_{k+1}, x_k]$, $k=0, \dots, n$ について、 $1/p$ なる直線の下、 $1/\phi(x_{k+1})$ の上にある矩形の面積の $k=0$ から n までの総和をとる。これに qP を乗じたものが目的函数値 P である。

多段系、連続系について、上の関係を Fig. 2-3 に示す。

Fig. 2-3 において、連続系の最適操作では抽出により得られる溶質量は、 $x = x_p$, $y=0$, $1/p$ で囲まれた長方形の面積に qP を乗じたもの、最適な所要第2溶媒量は $x = x_p$, x_0 の間、 $y = 1/\phi(x)$ の下、 $y=0$ の上の面積に q を乗じたものであって、価格上これに等しい溶質量はこの第2溶媒量に p を乗じたものとなる。よって、これらの差が利益であって、目的函数 P の値に等しい。

多段系では、得られる溶質量は連続系と同じもので表わされ等しいが、第2溶媒量には、 $x = x_{n+1} = x_p$, $x = x_0$ の間、階段状函数の下側、 $y=0$ の上側の面積が対応する。ただしこれは、 $x_{n+1} = x_p$ として、利益ゼロなる仮想的な段、第 $n+1$ 段を考えている。実在の系について得られる溶質量、所要第2溶媒量を考えるならば、それぞれを $x = x_n$, $x = x_0$ の間で考えればよい。

x_k , $k=1, \dots, n$ ($x_{k+1} < x_k$) を $[x_{n+1}, x_0]$ 上にとって、各区間 $[x_{k+1}, x_k]$, $k=0, \dots, n$ 上において、 $1/\phi(x)$ と $1/\phi(x_{k+1})$ とをそれぞれ積分する。

$$S_{ck} = \int_{x_{k+1}}^{x_k} \frac{dx}{\phi(x)} \quad (2-35)$$

$$\begin{aligned} S_{dk} &= \int_{x_{k+1}}^{x_k} \frac{dx}{\phi(x_{k+1})} \\ &= \frac{1}{\phi(x_{k+1})} (x_k - x_{k+1}) \end{aligned} \quad (2-36)$$

両者の差、 $E_k = S_{dk} - S_{ck}$ の総和をとる。

$$E = \sum_{k=0}^n E_k$$

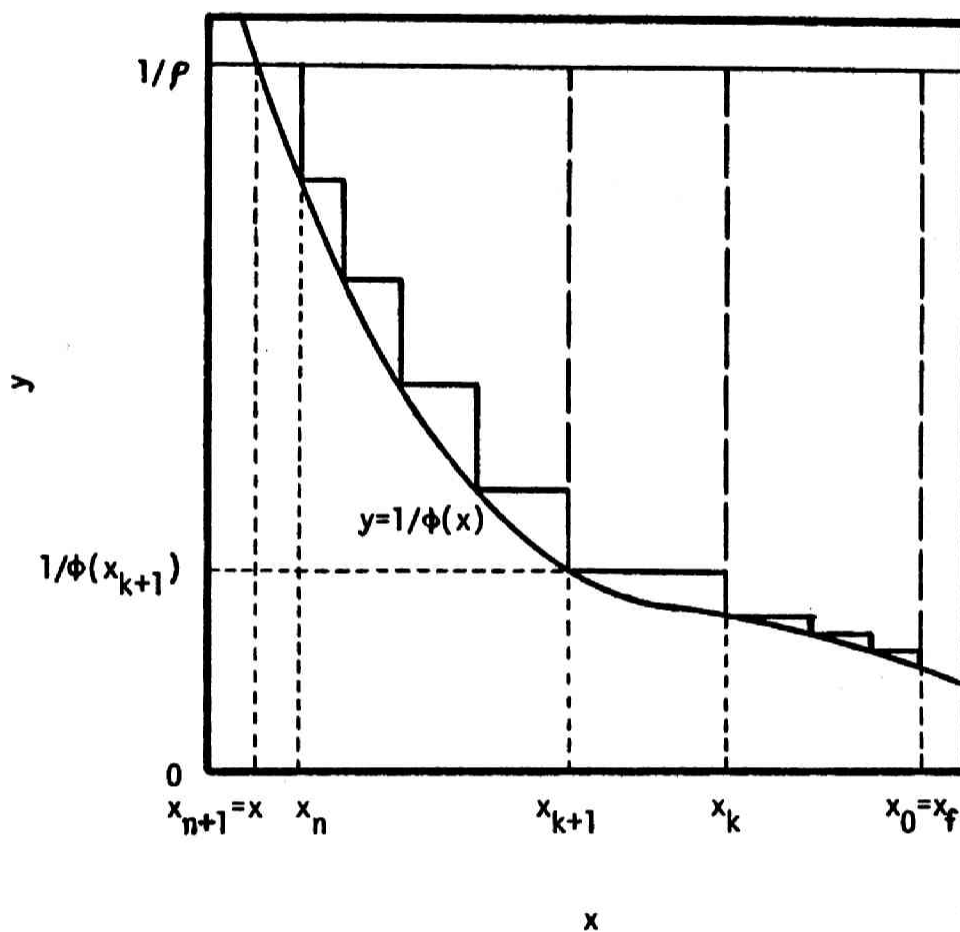


Fig. 2-3 Graphical interpretation of the maximum value of the objective function for the continuous process and of the value of the objective function for the multistage process

$$= \sum_{k=0}^n \left[\frac{1}{\phi(x_{k+1})} (x_k - x_{k+1}) - \int_{x_{k+1}}^{x_k} \frac{dx}{\phi(x)} \right] \quad (2-37)$$

(2-33)を最大化する多段系の最適化問題は, $x_k, k=1, \dots, n$ ($x_{k+1} < x_k$) を (x_{n+1}, x_0) 上に適当に取って, 各区間 $[x_{k+1}, x_k]$ において, $\frac{1}{\phi(x)}$ を $\frac{1}{\phi(x_{k+1})}$ によって上から近似し, それぞれの x 軸との間の面積, S_{ck}, S_{dk} の差 $E_k = S_{dk} - S_{ck}$ の $k=0$ から n までの総和 E を最小ならしめることに帰着する。(Fig. 2-4)

§6 最適化問題の一般化

前節のことを一般的に述べれば, ある区間 $[a, b]$ ($a=x_0, b=x_{n+1}$) において, n 個の分割点 $x_i, i=1, \dots, n$ を $x_{i-1} < x_i$ なるように適当に取って, 狭義の単調増加1階連続微分可能函数 $\Phi(x)$ を各区間において, 区間中の $\Phi(x)$ の最大値をもつ一定値函数で近似し, 誤差面積総和最小とする階段函数をつくる問題に帰着する。これは, $x_{i-1} < x_i, \Phi(x)$ は単調増加とすれば, 次の函数の最小化問題である。

$$P = \sum_{i=1}^{n+1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (\Phi(x_i) - \Phi(x)) dx \quad (3-38)$$

ここで考えている抽出プロセスの問題では, 当然次の関係がなりたつ。

$$\Phi(x) = \frac{1}{\phi(x)} \quad (3-39)$$

勿論, (2-33)の形の目的函数を一般化して, 最大化問題ともないうる。

$$P = \sum_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{\phi} - \Phi(x_i) \right) (x_i - x_{i-1}), \quad x_i > x_{i-1}, \\ i=1, \dots, n \quad (2-40)$$

§7 類似問題

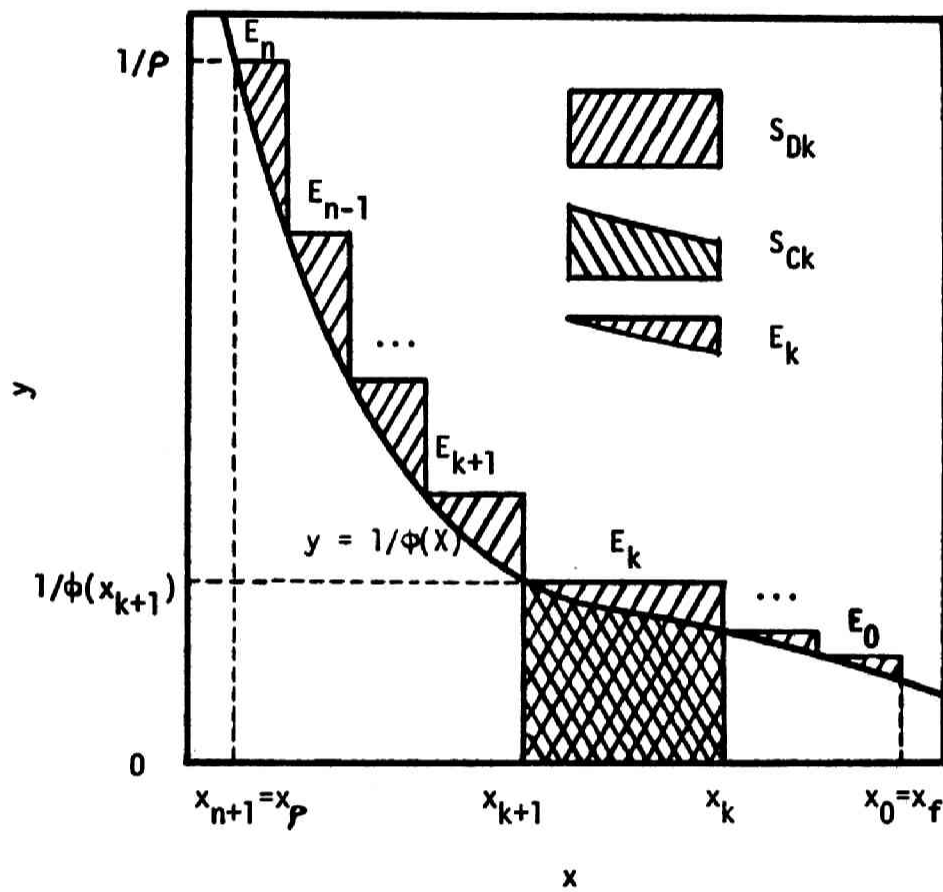


Fig. 2-4 Stepwise function which approximates the curve $1/\phi(x)$, and the error of approximation, $E = \sum_{k=0}^n E_k$

前節で述べたことは、抽出プロセスの最適化問題が、函数の或る種の最適近似問題におきかえられたことを示している。

在庫問題のひとつ、「在庫の消費が時間的に均等でない場合」に本質的に同一の問題を見出すことができる。

Langrueに従って、問題を述べる。⁴

在庫問題において、原料の消費が時点 t において既知の正值函数 $q(t)$ により定められているとする。ある時点 t_0 から他の時点 t までの原料消費量は積分

$$Q(t) = \int_{t_0}^t q(t) dt \quad (2-41)$$

このとき、保管と仕入の総費用が最小となるには、ある期間 T （たとえば1年）のいかなる時点において、いかなる量の原料の仕入を行うべきかを問題とする。

保管費用係数（在庫品1単位当りの期間 T での保管費） c 、1回の原料調達費 K は与えられているとする。

期間 T において、 t_0, t_1, \dots, t_n で $n+1$ 回の原料仕入を行うとする。未知の仕入時点は t_1, t_2, \dots, t_n の n 回である。 i 回に仕入れた原料は $i+1$ 回の仕入が行われるまでの需要をまかない得なければならぬ。 $t_{i-1} \leq t < t_i$ における在庫量は

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} [Q(t_i) - Q(t)] dt \geq 0 \quad (2-42)$$

期間 $[t_0, t_{n+1}]$,

$$t_{n+1} = t_0 + T \quad (2-43)$$

における在庫の総量は

$$\sum_{i=1}^{n+1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} [Q(t_i) - Q(t)] dt \quad (2-44)$$

仕入と保管の総費用 D は

$$D = nK + c \sum_{i=1}^{n+1} \int_{t_{i-1}}^{t_i} [Q(t_i) - Q(t)] dt \quad (2-45)$$

$Q(t)$ は単調増加函数であり、 n, K, C は一定であるから、 D を最小化する問題は、まさに、(2-38)を最小化することに等しい。

更に、化学反応プロセスの最適化問題にも類似問題を見出すことができる。

単一反応を、断熱多段反応槽列（段数一定）において行わせるとする。このとき、反応槽容積を各段についてどのように選ぶかを問題とする。

多段反応槽プロセスであるという意味においては、このプロセスは第6章で取扱うものと類似しているが、次の点で異なることに注意すべきである。即ち、第6章の系は槽容積が各段等しく、非断熱として、各段の温度を制御しようとするものである。又、槽内における反応も、第6章のそれは逐次反応である。§1に述べたように、第6章の反応プロセスの最適化問題と、本章の抽出プロセスの最適化問題との間には、相違がみとめられる。

ここで取上げている反応プロセスにおいて、第 i 段における反応は、反応物質の濃度を x_i で表わし、反応速度定数を k_i 、滞留時間を τ_i とすると、 m 次反応について、次式で表わされる。

$$x_i - x_{i-1} = -k_i x_i^m \tau_i \quad (2-46)$$

反応速度定数 k_i は第 i 段の槽内温度 T_i の函数であるが、系を断熱としているので、槽内温度は反応熱によって変化し、 T_i は x_i の函数となる。即ち、 $k_i x_i^m$ は x_i のみの函数となる。

$$r(x_i) = k_i x_i^m \quad (2-47)$$

この反応系について、Arisは次の最適化問題のDynamic Programmingによる解法を論じている。^{5,6} Arisによる問題は、 n 段反応槽列の最終段出口における反応物質濃度を所定の値にし、即ち、転化率を指定し、かつ、各段滞留時間 τ_i の総和を最小にするものである。即ち、

$$\sum_{i=1}^n \tau_i \quad (2-48)$$

を次の束縛条件(2-49)の下で最小にするものである。

$$x_n = \text{const} \quad (2-49)$$

(2-46), (2-47) から次式が導かれる。

$$\tau_i = -\frac{x_i - x_{i-1}}{r(x_i)} \quad (2-50)$$

更に、(2-51) のようにおくことによって(2-52)が得られる。

$$\Phi(x_i) = 1/r(x_i) \quad (2-51)$$

$$\tau_i = -(x_i - x_{i-1}) \Phi(x_i) \quad (2-52)$$

よって、この最適化問題は、 i について縦重 $\Phi(x_i)$ 、横 $-(x_i - x_{i-1})$ なる長方形の面積を考え、その総和

$$P = \sum_{i=1}^n \{-(x_i - x_{i-1}) \Phi(x_i)\} \quad (2-53)$$

を最小にする問題に帰着した。ただし、 $x_i - x_{i-1} < 0$ であって、 x_0, x_n の値はあらかじめ定められているものである。

同じ反応系に対し、上のものとは別の目的函数を取ることによって、異なる意味付の下で最適化問題を設定することが出来る。各段について、その滞留時間に比例した経費が必要であるとする。具体的には、槽建設費の償却、あるいは触媒消費量の経費が考えられよう。 i 段における反応生成物と滞留時間より定まる経費との差、即ち、 i 段において得られる利益は、

$$-(x_i - x_{i-1}) - \rho \tau_i \quad (2-54)$$

ここで、 ρ は生成物と滞留時間との価格比である。 $i = 1, \dots, n$ について総和をとると、

$$P = \sum_{i=1}^n \{-(x_i - x_{i-1}) - \rho \tau_i\} \quad (2-55)$$

(2-52) により、

$$P = -\sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{\rho} - \Phi(x_i) \right\} (x_i - x_{i-1}) \quad (2-56)$$

最適化問題は P を最大ならしめる x_i , $i = 1, \dots, n$ を求めることである。この函数の値は、 $\Phi(x_{n+1}) = 1/\rho$ なる x_{n+1} をとって、

$$P = -\sum_{i=1}^{n+1} \left\{ \frac{1}{\rho} - \Phi(x_i) \right\} (x_i - x_{i-1}) \quad (2-57)$$

としたものと同じである。

この多段反応系について、上述の2つの最適化問題は、§6に述べた一般化された問題に帰着することがわかる。

抽出問題と比較すれば、抽出における平衡曲線式 $\phi(x)$ に相当するものが、濃度の函数としての反応速度 $r(x)$ であり、第2溶媒の配分量 u_i に相当するものが、反応系においては、滞留時間 τ_i となっている。

Arisは上述1番目の問題に対するものとして、Dynamic Programming から導いた図解法を与えている。これは、後にふれるLangeによる図解法とは異なるもので、反復解法ではない。しかし、その方法は、図解のために作図曲線の計算をすることを必要とする。

また、一般には $r(x)$ 、従って(2-51)によって定義された $\Phi(x)$ 函数が単調

になるとは限らない。この点においては、本節のはじめに述べた在庫問題と異なっている。

§8 局所最適点の必要条件

一般化された問題の目的函数(2-40)を最大ならしめる必要条件は、目的函数の偏導函数

$$\frac{\partial P}{\partial x_i} = - \frac{d\Phi(x_i)}{dx_i} (x_i - x_{i-1}) + (\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)),$$

$$i=1, 2, \dots, n \quad (2-58)$$

がすべてゼロとなることから

$$\frac{d\Phi(x_i)}{dx_i} = \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_i - x_{i-1}}, \quad i=1, 2, \dots, n \quad (2-59)$$

(2-59)は $y = \Phi(x)$ の x_i における接線と、2点 $(x_i, \Phi(x_{i+1}))$, $(x_{i+1}, \Phi(x_i))$ を結ぶ直線とが平行であることを意味する。(Fig. 2-5) また、(2-59)を満たす点が函数(2-40)の停留点であることは、点 x_i の微小変動 Δx_i に対する $1/P$ の下、階段函数の上、区間 $[x_{i-1}, x_i]$ の面積の変化の1次の項がゼロとなることから、図形的にも示される。(Fig. 2-5)

抽出問題に対しては、必要条件(2-59)は当然次式でおきかえられる。

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\phi(x)} \right)_{x=x_i} = \frac{1/\phi(x_{i+1}) - 1/\phi(x_i)}{x_i - x_{i-1}} \quad (2-60)$$

(2-59)から、最適条件の図式解法を導くことも Lange によって述べられている。^{3, 4}

§9 最適な分割点の分布と函数 $\Phi(x)$ の形状

§6において述べた一般化された問題の函数 $\Phi(x)$ の形状に、或る仮定を導

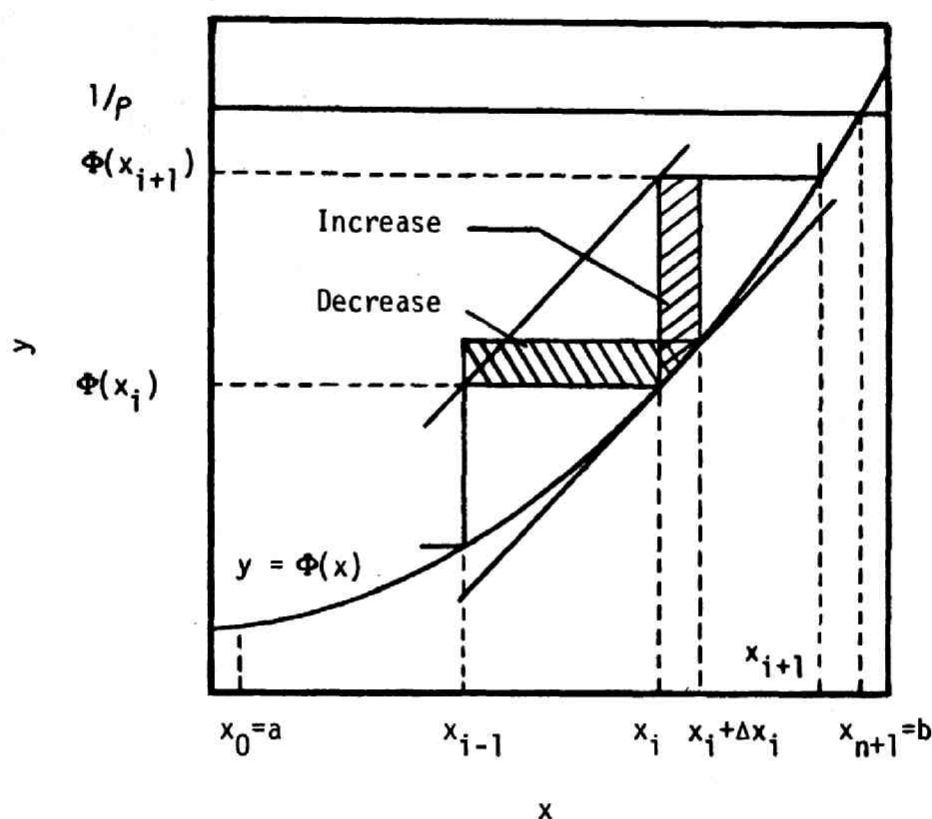


Fig. 2-5 Schematic diagram of the necessary condition given in Eq.(2-47) and the increase and decrease of the area above the stepwise function and under $y = 1/\rho$ caused by a small fluctuation of x_i , Δx_i , where

$$\begin{aligned} \text{Increase} &= \{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)\} \Delta x_i, \\ \text{Decrease} &= (x_i - x_{i-1}) \Delta x_i \Phi'(x_i), \quad \Phi'(x_i) = \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_i - x_{i-1}}. \end{aligned}$$

入したとき、最適な分割点 x_i , $i=1, \dots, n$ の間隔について、いくつかの関係が導かれる。これを定理として与える。

定理 2-1

函数 $\Phi(x)$ が閉区間 $[x_i, x_{i+1}]$ 上において狭義の単調増加であり, $x_{i-1} < x_i$ であって, 次の関係がなりたつとする。

$$\Phi'(x_i) = \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_i - x_{i-1}}, \quad i=1, \dots, n \quad (2-61)$$

このとき, $\Phi'(x)$ が半閉区間 $[x_i, x_{i+1})$ 上で単調増加であるなら,

$$x_i - x_{i-1} \geq x_{i+1} - x_i \quad (2-62)$$

であり, もし, $\Phi'(x)$ が $(x_i, x_{i+1}]$ 上で単調減少であるなら,

$$x_i - x_{i-1} < x_{i+1} - x_i \quad (2-63)$$

である。上の, (2-62), (2-63)における等号は, 函数 $\Phi'(x)$ が $[x_i, x_{i+1})$ で一定となる広義の単調増加函数であるときにのみなりたつ。

証明:

平均値の定理より, 次の関係をみたす ξ_i が存在する。

$$\Phi'(\xi_i) = \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_{i+1} - x_i}, \quad x_i < \xi_i < x_{i+1} \quad (2-64)$$

$\Phi'(x)$ が (x_i, x_{i+1}) で (広義の) 単調増加函数ならば,

$$\Phi'(x_i) \leq \Phi'(\xi_i) \quad (2-65)$$

よって,

$$\frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_i - x_{i-1}} \leq \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad (2-66)$$

$\Phi(x)$ が単調増加だから, $\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i) > 0$ であるので, (2-62)が得られる。

$\Phi(x)$ が (広義の) 単調減少なるとき,

$$\Phi(x_i) \geq \Phi(\xi_i), \quad x_i \leq \xi_i \leq x_{i+1} \quad (2-67)$$

なる故, 同様にして証明される。

系 1

$\Phi(x)$ と $\Phi'(x)$ が閉区間 $[a, b]$ において単調増加函数であるとする。このとき、

$$x_{i+1} - x_i \leq x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2-68)$$

$$\max_i (x_i - x_{i-1}) = x_1 - x_0, \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (2-69)$$

ただしここで、 $x_0 = a$, $x_{n+1} = b$, $x_i > x_{i-1}$ としている。

この系は、上の仮定の下では、副区間 (x_i, x_{i+1}) , $i = 0, 1, \dots, n$ の中で最も長いものは、 $[a, b]$ の中で $\Phi(x)$ の勾配が最小になる点を含むことを意味する。

系2

$\Phi(x)$ が $[a, b]$ 上で単調増加であって、 $\Phi'(x)$ が $[a, c]$ 上で単調減少、 $[c, b]$ 上で単調増加とする。 $(a < c < b)$

このとき、次の関係がなりたつ。

$$x_1 - x_0 \leq x_2 - x_1 \leq \dots \leq x_{k-1} - x_{k-2} \quad (2-70)$$

$$x_k - x_{k-1} \geq x_{k+1} - x_k \geq \dots \geq x_n - x_{n-1} \geq x_{n+1} - x_n \quad (2-71)$$

$$\max_i (x_i - x_{i-1}) = x_k - x_{k-1} \quad \text{or} \quad x_{k-1} - x_{k-2} \\ i = 1, \dots, n+1 \quad (2-72)$$

ただし、次式がなりたっているとする。 $x_0 = a$, $x_{n+1} = b$, $x_i < x_{i+1}$ であり、かつ $x_{k-1} < c < x_k$ 。また、 $x_k = c$ なるとき、(2-70), (2-71)に加えて(2-73)がなりたち、(2-74)が得られる。

$$x_{k-1} - x_{k-2} \leq x_k - x_{k-1} \quad (2-73)$$

$$\max_i (x_i - x_{i-1}) = x_k - x_{k-1}, \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (2-74)$$

$\Phi'(x)$ が狭義の単調函数のとき、上の等号はなりたたない。

この系によれば、仮定された場合においては、最も長い区間内あるいはひとつ隣の区間内に最も $\Phi(x)$ の勾配の小さな点が存在する。

§10 局所最適点の充分条件

(2-38)あるいは(2-40)の函数を極小あるいは極大にするための必要条件は § 8 の(2-59)に与えた。ある点がこの式をみたすとき、局所最大(最小)であるための充分条件を述べる。

議論の簡単化のため、(2-40)の函数の最大化問題を、函数に負符をつけることによって最小化問題にする。即ち、

最小化問題： 次の函数を最小化せよ。

$$P_- = - \sum_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{\rho} - \Phi(x_i) \right) (x_i - x_{i-1}),$$

$$\text{ただし, } x_i > x_{i-1} \quad (2-75)$$

ある点が、(2-59)を満たし、かつその点における P_- の Hessian 行列が正定値であることが、 P_- が局所最小点となる必要充分条件である。

P_- の Hessian 行列は、目的函数の形から分るように三重対角行列(tridiagonal matrix)である。即ち、Hessian 行列を $T = (t_{ij})$ とするとき、

$$\begin{aligned} t_{ii} &= \frac{\partial^2 P_-}{\partial x_i^2} \\ &= 2 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_{x_i} (x_i - x_{i-1}), \quad i = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (2-76)$$

$$\begin{aligned} t_{i,i-1} &= \frac{\partial}{\partial x_{i-1}} \left(- \frac{\partial P_-}{\partial x_i} \right) \\ &= - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i}, \quad i = 2, \dots, n \end{aligned} \quad (2-77)$$

$$\begin{aligned} t_{i,i+1} &= \frac{\partial}{\partial x_{i+1}} \left(- \frac{\partial P_-}{\partial x_i} \right) \\ &= - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_{i+1}}, \quad i = 1, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (2-78)$$

$$t_{ij} = 0, \quad |i-j| \geq 2 \quad (2-79)$$

この対称な三重対角行列 T が正定値となる条件を求める。

定理 2-2

対称, 既約 (irreducible), 対角要素が正でしかも優越する行列は, 正定値である。⁷

ここで, 正方行列が既約とは, 可約 (reducible) でないことであり, 可約とは, 行のある置換と, 列の (通常は別の) 置換とによって, 行列 A を整理して

$$\begin{bmatrix} B & \ominus \\ C & D \end{bmatrix}$$

という形に書きかえられることである。ただし, B, D は正方形列, \ominus はゼロ行列である。また, 行列 A の要素がすべての i に対し,

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad (2-80)$$

を満たし, 少なくともひとつの i に対して狭義の不等式を満たすとき, A は対角要素が優越 (diagonally dominant) するといふ。

さて, P_- の Hessian 行列 T は対称であり, かつ既約である。よって, 次の定理がえられる。

定理 2-3

点 x , $x_i - x_{i-1} > 0$ において, P_- が局所最小点である必要条件 (2-59) を満たし, かつその点における P_- の Hessian 行列の対角要素が正で優越しているならば, x は局所最小点である。

P_- の Hessian 行列 T のある行について,

$$t_{ii} = 2 \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_{x_i} (x_i - x_{i-1}) \quad (2-81)$$

$$\sum_{j \neq i} |t_{ij}| = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_{i+1}}, \quad i=1 \quad (2-82)$$

$$\sum_{j \neq i} |t_{ij}| = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_{i+1}}, \quad i=2, \dots, n-1 \quad (2-83)$$

$$\sum_{j \neq i} |t_{ij}| = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i}, \quad i=n \quad (2-84)$$

区間 (x_{i-1}, x_i) で Φ と $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ とが単調増加であって $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$ が広義の単調減少の正函数のとき,

$$t_{ii} > 0 \quad (2-85)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_{i+1}} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_i} &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} dx \\ &\leq \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_{x_i} (x_{i+1} - x_i) \\ &\leq \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_{x_i} (x_i - x_{i-1}) \end{aligned} \quad (2-86)$$

(2-86)の下不等式は定理2-1による。

このとき

$$t_{ii} \geq \sum_{j \neq i} |t_{ij}|, \quad i=2, \dots, n-1 \quad (2-87)$$

$$t_{ii} > \sum_{j \neq i} |t_{ij}|, \quad i=1, n \quad (2-88)$$

よって、定理2-4, 2-5を得る。

定理 2-4

点 x ($x_i > x_{i-1}$, $i=1, \dots, n$)が(2-59)を満たし、ある i について区間 (x_{i-1}, x_{i+1}) で Φ , $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ が単調増加で $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$ が広義の単調減少の非負函数であるなら、(2-87), (2-88)がなりたつ。

定理 2-5

区間 $[a, b]$ で Φ , $\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ が単調増加函数であって、 $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$ が広義の単調減少非負函数なるとき、点 x ($x_i > x_{i-1}$, $i=1, \dots, n$)が(2-59)を満たせば、この点は局所最小点である。

§7で述べた在庫理論の問題において、原料消費量の函数 $q(t)$ が単調増加で、これの時間微分 $\frac{dq}{dt}$ が広義の単調減少非負函数のとき、 Φ , Φ' , Φ'' は上の定理2-5の条件を満足する。これは、原料消費が全区間 T 内で、その増加速度を減じつつ増加する場合である。

References

- 1 Aris, R., Rudd, D.F., and Amundson, N.R.: On optimum cross-current extraction, Chemical Engineering Science, Vol.12, 1960, pp.88-97.
- 2 Lee, E.S.: Optimization by a gradient technique, I&EC Fundamentals, Vol.3, 1964, pp.373-380.
- 3 高松, 佐山, 大井: 2次収束グラジエント法による抽出プロセスの最適設計, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.313-321.
- 4 Lange, O., (有木, 岩田 訳): 最適決定論 プログラムの原理, 合同出版, 東京, 1970, pp.287-294.
- 5 Aris, R.: The optimal design of chemical reactors A study in dynamic programming, Academic Press Inc., New York, 1961, xi+191p.
- 6 Aris, R.: Introduction to the analysis of chemical reactors, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1965, xi+337p.
- 7 Forsythe, G.E., and Moler, C.B., (渋谷, 田辺 訳): 計算機のための線形計算の基礎 連立1次方程式のプログラミング, 培風館, 東京, 1969, pp.143-149.

第3章 多段十字流抽出プロセスの最適化問題 における多峰性の解析

§1 多峰性解析の一般的意義

多峰(multimodal)というのは、局所最大点(最小点)が複数個存在する函数の形状をいうものとする。(最小化の場合も含めておく。本章では、前章に引続き、最大化問題として、抽出プロセスの最適化問題を取扱ってゆく。)局所最大点が唯一である函数を単峰(unimodal)という。

目的函数が多峰である例は化学プロセスの最適化問題に関して多くは報告されていないように思われる。多峰性のみられる例に関して、多峰性の生ずる原因、峰の数、位置などについて系統的に追究したものは、著者の知る限りでは存在しない。

最適化問題をグラジエント法を含めた山登り法によって解くとき、或るひとつの点から出発して探索を行って得られるものは、計算が首尾よく行われたとしても、局所最適点であるにすぎない。その他の最適化手法を含めて、何等かの方法で求められた局所的最適点が大域的にも最適であるか否かを判断する際、目的函数が多峰であるか否かを知ることは、決定的である。単峰であることが知られているならば、得られた局所的最適点が大域的にも最適である。多峰であっても、峰数がわかっていれば、その個数だけ局所的最適点を求めた後、それらの点の函数値を比較すれば、大域的最適点がいずれであるかがわかる。単峰であるか、あるいは多峰であるとして、局所最大点がいくつぐらいあるかを事前に知っていれば、大域的最適点決定の手順が定まるばかりでなく、手順実行の所要計算時間もあらかじめ概算できることになる。

化学プロセスを含め、工業上のプロセスにおいて設定された最適化問題の目的函数に多峰性が存在すれば、最適設計や操作の上で単峰のプロセスに対するとは異った処置を取ることが考えられよう。この考え方は第Ⅱ篇第4章において与えた感度解析の応用におけるものと或る意味で似ている。感度解析によって操作変数(設計変数)に対する目的函数値の変動量を考慮して、真の最適点から多少離れていても、目的函数値のはなはだしい悪化をきたさない範囲内で操作(設計)のしやすい点を探るという考え方ができよう。建前から言えば、操作(設計)のしやすさも数量化して目的函数に繰込んでおかれるべきものであるが、実際のプロセスについてはそのようにすることは容易ではない。多峰性のみられる場合においても、同様の配慮によって、大域的には最適でない局所最適点を実用上の操作(設計)点とすることが考えられる。異なる局所最大点

間の距離は、感度解析の場合の最適点とその近くにとられた点との距離と較べれば、遙かに大なることが多いであろうから、目的函数に繰込めなかったところの条件が感度解析におけるよりも大幅に変わるであろう。

このような、実用的な意義と対照的に、いかなる場合に多峰性が現れるかを知らねば、目的函数、プロセスモデルの性質を知ることにもなる。得られた知見から、適切な目的函数の設定、プロセスモデルの作り方が知られることもあろうし、あるいは、実用上有用な関係が導かれることもあるであろう。

§2 抽出プロセスの最適化問題と平衡曲線

以下の§3, §4においては、第2章において考察したものと同一抽出プロセスの最適化問題を対象とする。この多段十字流抽出プロセスの最適化問題において、多峰性がみられることは、Aris et al. が Dynamic Programming によってこの問題を解いた際に言及しているが詳しくは論じていない。¹ 別の研究者は、上の Aris et al. の問題のリサイクルの有る場合について、多峰性がみられなかったと述べている。² いずれにしても、この系に対する多峰性の研究は組織的に行われることはなかった。

ここで取上げている抽出プロセス最適化問題において、多峰性の具体的な意味はどのようなものであるかについて述べる。

最適化問題の目的函数は、第2章における(2-7)ないし(2-11)で表わされる。ただし、リサイクルのない場合のみを考えているので $r=0$ である。 x_i なる状態変数についてこの最適化問題を扱ってよいことは、第2章§2に述べたので、目的函数は(2-11)により表わされるものとしてよい。状態変数 x_i は、ここでは多段抽出プロセスの第1溶媒中の各段出口濃度を表わしている。段数を n として、本章で論じようとするのは、 x_1, x_2, \dots, x_n の函数(2-11)が、(2-34)を満たす領域内において、局所最大点をいくつ、どのような位置に持つかということである。

目的函数が単峰、つまり局所最大点が唯1点のみ存在するならば、プロセスからあがる利益を最大にする各段出口濃度 x_i のとり方は、1組のみ定まることとなる。

ところが、もしこのプロセスの目的函数が多峰であるなら、利益を最大にする点、即ち、利益を最大にする各段の第1溶媒出口濃度 x_i のとり方が一意ではなく、複数個存在することを意味する。勿論、これに対応して、利益最大とするような第2溶媒の各段への流量の組は複数組存在することになる。ただし、ここでは、最大というのは局所的に最大という意味である。

著者は、抽出平衡曲線として Aris et al. の用いた曲線を持つとしたこの最適化問題について、多峰性の現れ方を次の2つの場合について調べたので、これを§3, §4に述べる。

i) 原料入口濃度 x_f を変化させた場合

ii) 段数を変化させた場合

i), ii)のそれぞれの場合について、変化に対応した局所最大点の数、位置などを系統的に研究し、又、その結果について、第2章の結果と対照して、多峰性の生じる原因について考察する。

平衡曲線は次式で与えられ、そのグラフは、 $1/\phi(x)$ のグラフと共に、Fig. 3-1に与える。

$$\phi(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + fx^5,$$

$$a = 0.00099, \quad b = 1.7971, \quad c = 35.196,$$

$$d = -633.84, \quad e = 3371.3, \quad f = -5916.0,$$

$$\text{定義域 } 0 \leq x \leq 0.2 \quad (3-1)$$

この平衡曲線式は、Aris et al. がグラフで与えたもの¹を、5次式で近似したものである。³

溶質と第2溶媒の価格比 p は0.05とした。

なお、前に述べた通り、本章においてはリサイクルを有する系は扱っていない。

局所最大点を求めるための計算は、Davidon-Fletcher-Powell^{4,5}法によったが、計算に関する議論は第5章で一括して扱っている。

§3 原料入口濃度変化に対する多峰性

段数を10段として、原料入口濃度 x_f を変化せしめた場合の多峰性を調べたところ、局所最大点の数とその位置が、ある傾向を持って変化してゆくことがわかった。

原料入口濃度 x_f を0.2, 0.1875, 0.175, 0.1625, 0.15, 0.125, 0.1に取って、それらについて局所最大点を求めた。

その結果、 $x_f = 0.2$ については、局所最大点が3個見出された。又、 $x_f = 0.1875$ および $x_f = 0.175$ については、局所最大点が2個見出された。それに対し、 $x_f = 0.1625$ 以下については、局所最大点は1個のみ見出された。

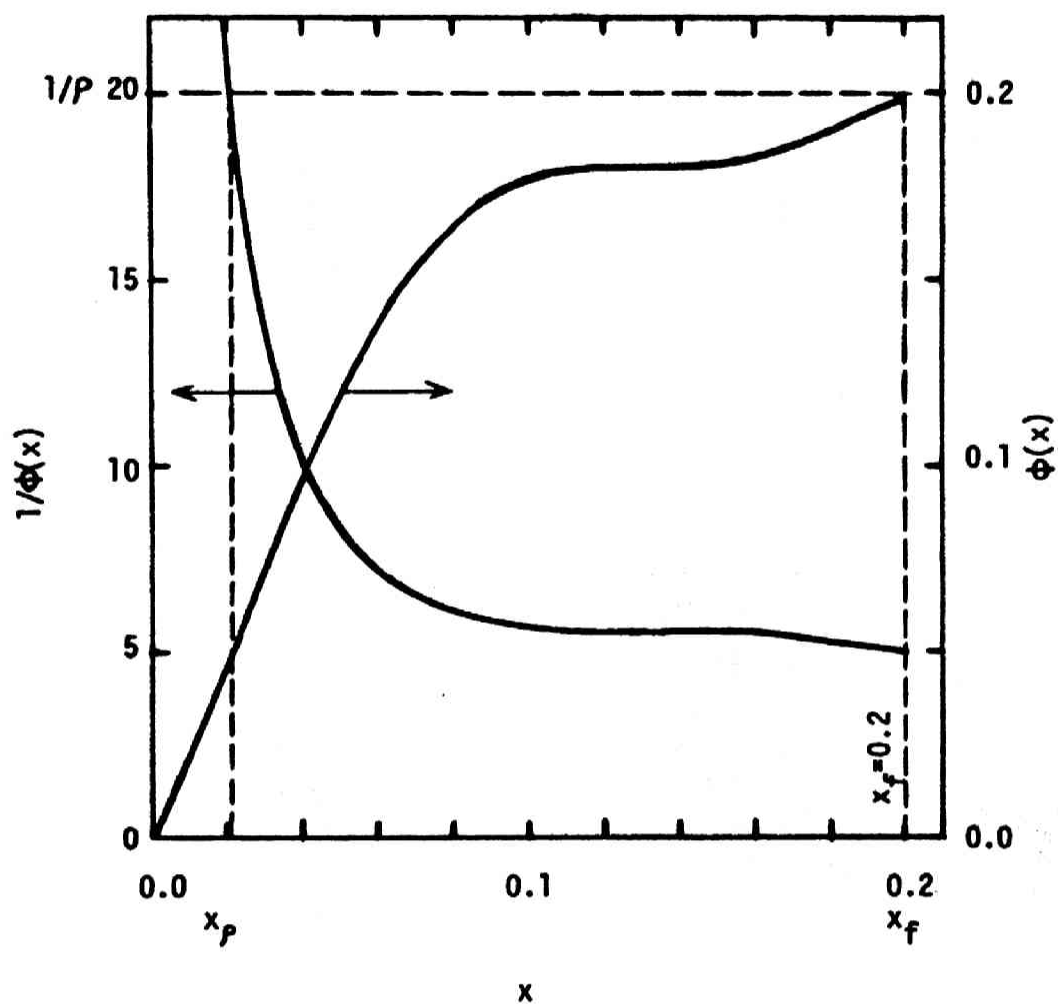


Fig. 3-1 Equilibrium curve $\phi(x)$ given in Eq. (3-1) and reciprocal function $1/\phi(x)$.

この結果から、入口濃度 α_f の減少に伴って局所最大点の個数も減少していることがわかるが、単に減少するのみならず、 α_f の値が異っても、局所最大点の間に、ある対応がみられ、局所最大点の減少にも一定の順序が存在する。このことを示すために、 $\alpha_f = 0.2 \sim 0.15$ の場合について、それぞれの最適濃度分布をFig. 3-2 に掲げる。Fig. 3-2 において、各段濃度 α_k は入口濃度 α_f で除して表わしてある。Fig. 3-2 からわかるように、局所最大点の位置、図中でいえば最適濃度分布を表わす折線の形は、3グループに分けられる。即ち、

グループ1： 大幅な濃度減少が第1段でなされるもの。

グループ2： 大幅な濃度減少が第2段でなされるもの。

グループ3： 大幅な濃度減少が第3段でなされるもの。

入口濃度 $\alpha_f = 0.2$ について得られた3個の局所最大点が、上の3グループのいずれに属するかをFig. 3-2 によって検討すると、それらはひとつずつ、グループ1、グループ2、グループ3に属していることがわかる。同様に、Fig. 3-2 によって、 $\alpha_f = 0.1875$ と $\alpha_f = 0.175$ について2個ずつ得られた局所最大点の属するグループを調べると、それぞれの α_f の値について、グループ1とグループ2に各1個属するものがあり、グループ3に属するものが失われていることがわかる。更に α_f の値を減少せしめ、 $\alpha_f = 0.1625$, 0.15 とすると、グループ1に属する局所最大点のみとなることもFig. 3-2 により知られる。 $\alpha_f = 0.125$, 0.1 についても、同じくグループ1に属する局所最大点のみが各1個見出された。

Fig. 3-1 に掲げた平衡曲線のグラフと、最適濃度分布とを対照する。大幅な濃度減少は平衡曲線の勾配の最も小となる点の近くで起っている。1個のみの局所最大点を持つ場合は、 α_f は平衡曲線の勾配の小となる区間かその左にある。

最適濃度分布に対応する最適第2溶媒流量分布について考察する。

多峰となる場合について、最適第2溶媒流量分布をFigs. 3-3, 3-4, 3-5 に掲げる。グループ1, 2, 3に属する最適濃度分布はそれぞれ、第1段、第2段、第3段に第2溶媒を集中的に与える操作に対応している。即ち、大幅な濃度減少の生ずる段に第2溶媒を集中させることとなっている。Figs. 3-6, 3-7 に示したように、グループ1のみの単峰の場合については、第1段に第2溶媒を集中的に与える操作になっている。

α_f が大なるとき、局所最大点が第1段、第2段、第3段のいずれかに第2溶媒を集中させることとなっていて、第1, 2, (3) 段に同じぐらいずつ集中させるという操作が局所最大点になっていないのである。又、平衡曲線が水平に近くなっているところに第2溶媒を集中させることになっていることは、さきに大幅な濃度減少の生ずる段と平衡曲線の関係にみたことからわかる。

各局所最大点に対する目的函数値をTable 3-1に与える。この表によれば、

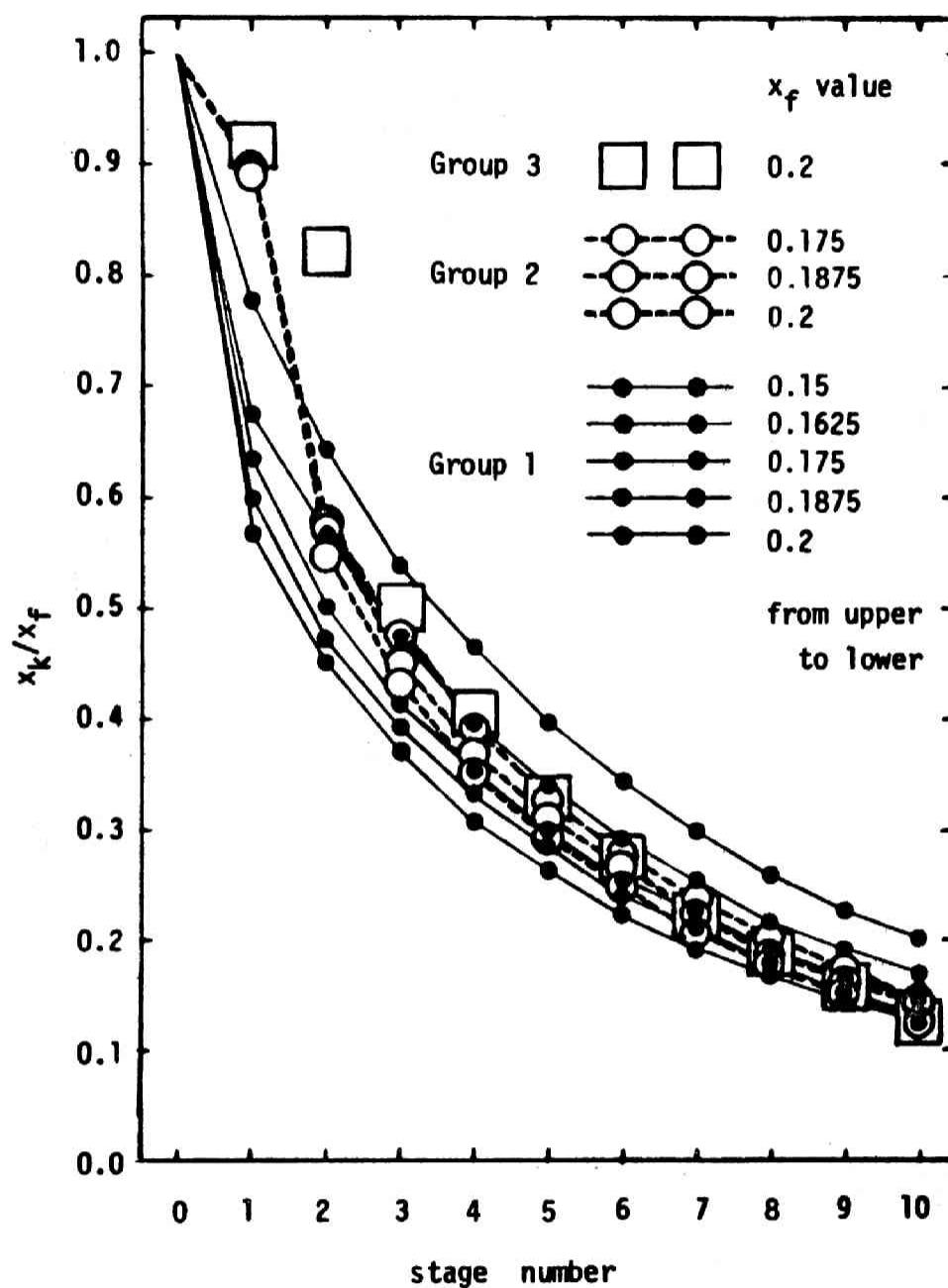


Fig. 3-2 Local optimum points with several values of feed concentration, x_f

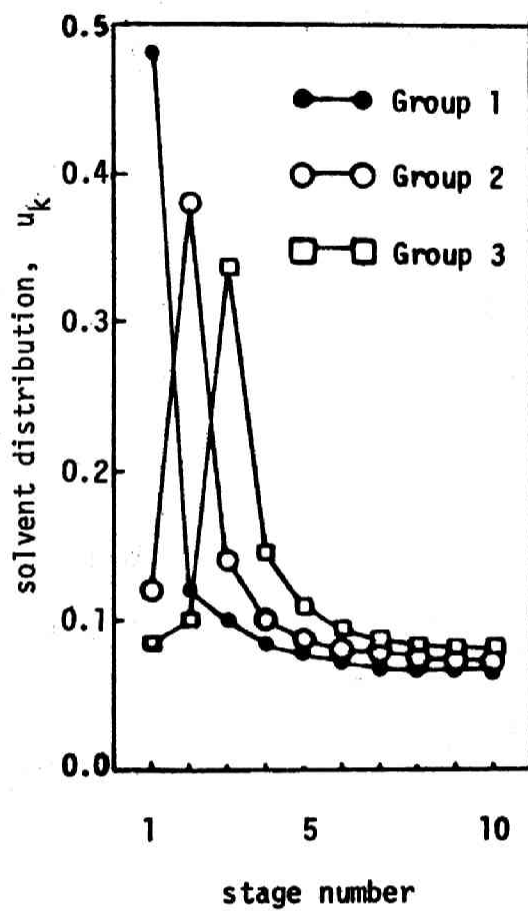


Fig. 3-3 Optimum solvent distribution for $x_f=0.2$

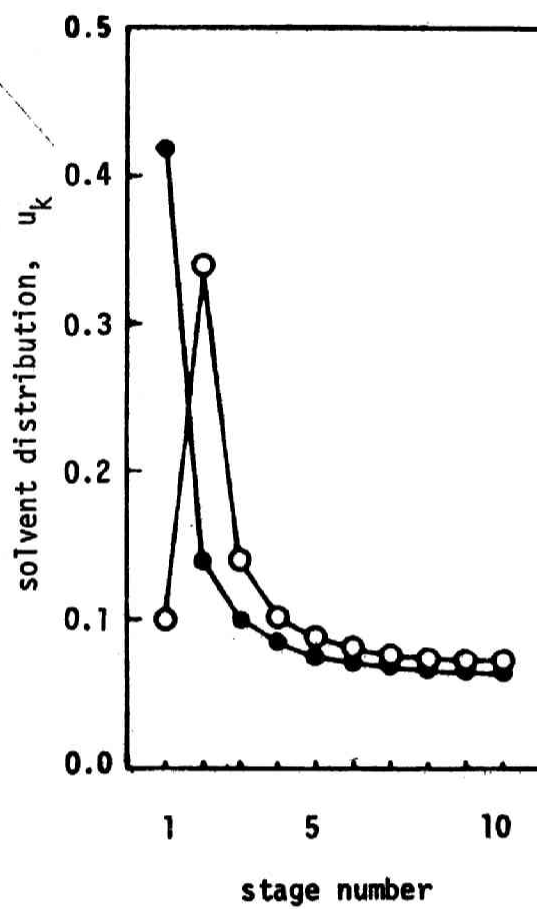


Fig. 3-4 Optimum solvent distribution for $x_f=0.1875$

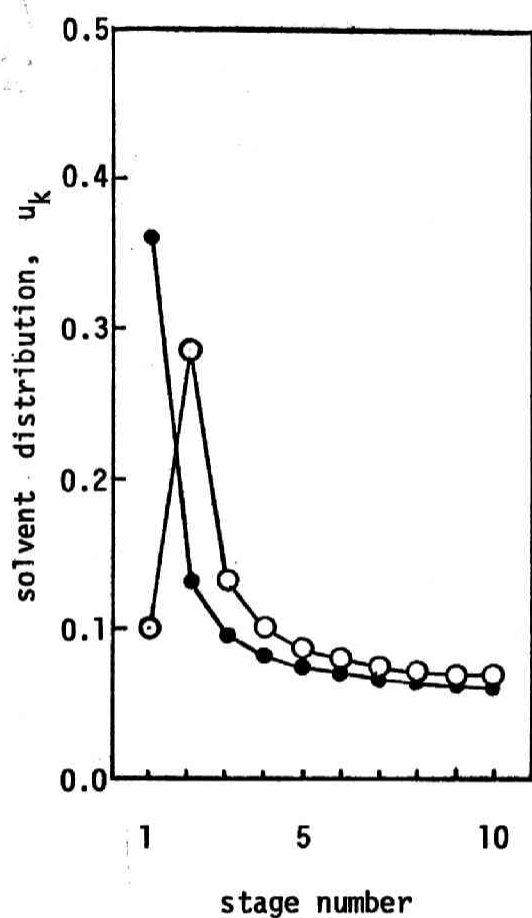


Fig. 3-5 Optimum solvent distribution for $x_f = 0.175$

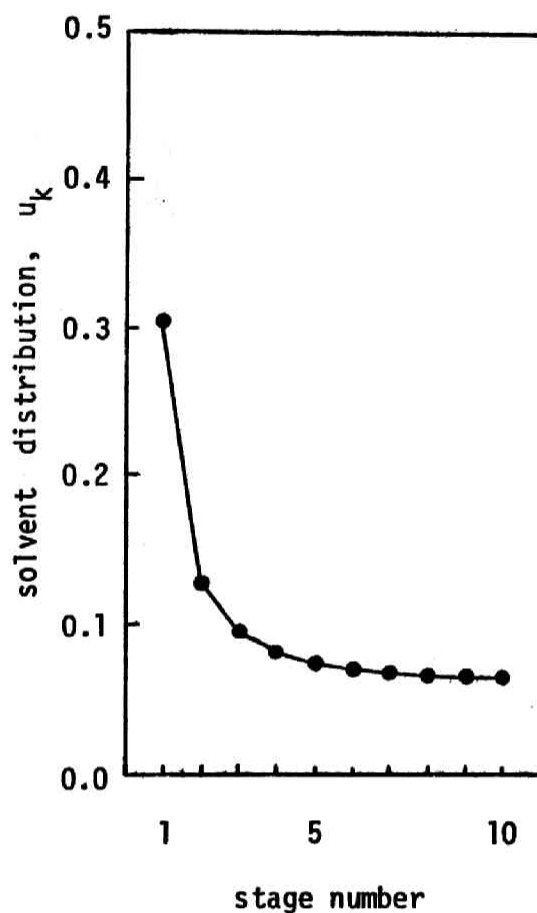


Fig. 3-6 Optimum solvent distribution for $x_f = 0.1625$

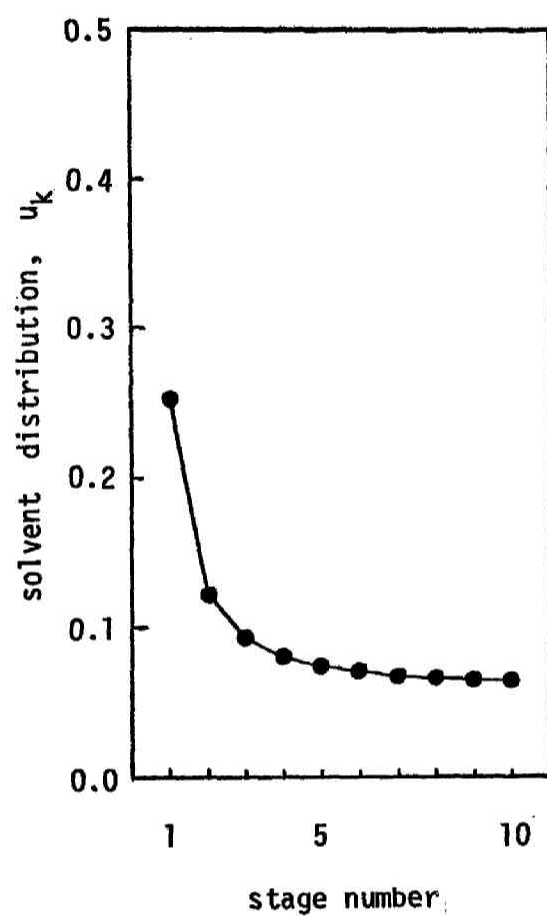


Fig. 3-7 Optimum solvent distribution for $x_f=0.15$

Table 3-1 Value of the objective function
for local optimum points with
several values of feed concentra-
tion

| <u>Group</u> | 1 | 2 | 3 |
|--------------|------------------|------------------|-----------|
| x_f | | | |
| 0.1 | <u>0.0425636</u> | - | - |
| 0.125 | <u>0.0602878</u> | - | - |
| 0.15 | <u>0.0782299</u> | - | - |
| 0.1625 | <u>0.0872311</u> | - | - |
| 0.175 | <u>0.0962417</u> | 0.0960370 | - |
| 0.1875 | <u>0.1052579</u> | 0.1051294 | - |
| 0.2 | 0.1142778 | <u>0.1142816</u> | 0.1140369 |

_____ denotes global optimum

大域的に最大となる段も x_f の変化につれて変化していることがわかる。

上に述べた多峰性の現れ方の傾向について、第2章で論じたことを基礎に検討を加える。

いくつかの局所最大点が見出される場合についても、その点の位置(濃度変化)に型があって、その型によってグループ分けができたのであった。型は、位置ベクトル x の成分 x_i (各段濃度) が順次添字番号 i の順に小になっているとき、第何成分において大幅な濃度減少がみられるか、ということであった。このことは前章の見方からすれば、区間 $a = x_f$, $b = x_{n+1}$ 上の分割点 x_i , $i = 1, \dots, n$ について、副区間長

$$|x_{i-1} - x_i|, \quad i = 1, \dots, n \quad (3-2)$$

をとるとき、いかなる i の値に対して、 $|x_{i-1} - x_i|$ が他者に較べて大幅に大になるか、ということである。

前章 §9 の定理 2-1 の2つの系をもとに、平衡曲線の逆数函数 $\psi(x) = 1/\phi(x)$ (Fig. 3-1) の形状と多峰性の関係を考える。 $\psi(x)$ の形状を参照すれば、まず入口濃度 x_f が小なるとき、区間 $[x_{n+1}, x_0]$ ($x_0 = x_f$) 上で $\psi(x)$ が単調減少、 $\psi'(x)$ は単調増加であることがみられる。よって、定理 2-1 系1により、副区間長 $|x_{i-1} - x_i|$ が $i = 1$ のとき最大であることが導かれる。即ち、 $1/\phi(x)$ の曲線の形からして、 $x_f = 0.1625 \sim 0.1$ をとったとき、グループ1に属する局所最大点のみが現れて、他のものが現れないことは、定理 2-1 系1により当然とされることである。 $x_f = 0.1625$ のように区間 $[x_{n+1}, x_0]$ 上で $\psi(x)$ が単調といいきれないものも、分割点数 n が少ないので、グループ1のみが生じたと考えてよいであろう。

$x_f = 0.175, 0.1875, 0.2$ の場合について考察しよう。このときは、区間 $[x_{n+1}, x_0]$ 上 x_0 寄りに $\psi(x)$ の増加から減少に切替わる点が存在する。よって、グループ1, 2, 3のいずれに属する局所最大点が現れたとしても、この切替わる点、即ち、 $\psi(x)$ がほぼ水平になった点を含む区間で大幅な濃度減少の起っていることは、定理 2-1 系2と矛盾しない。グループ2, 3のように最大な副区間 $|x_{i-1} - x_i|$ が $i = 2, 3$ に対して生じるとは、切替え点が区間 $[x_{n+1}, x_0]$ の内部にないとき、このプロセスでは x_f が或る値より小のとき、起りえないことは定理 2-1 系1より明らかである。

このように、本節で数値計算結果から明らかにした最適濃度分布の多峰性の傾向は、前章の定理 2-1 の系とよく対応している。

§4 段数の変化に対する多峰性

前節では、総段数を10段として、原料の溶質濃度の変化に対して、局所最適点の数と位置について、ある傾向を明らかにした。そこで見たことは、平衡曲線の形によって局所最適点の数が変わることであり、平衡曲線の函数あるいはその逆数の函数曲線がほぼ水平となる位置が関係しているということであった。

段数10の系において最も局所最大点の個数の多かった $x_f=0.2$ の場合について考える。このとき、局所的に最適な操作で平衡曲線のほぼ水平な部分を含むような大幅な濃度減少を第1, 第2, 第3段目のいずれかで行わせるようなものがあつたのである。段数を増加せしめれば、全プロセスをより細く分割することになる。そのとき、10段のプロセスでは、1〜3段によってなされていた平衡曲線函数の逆数の函数の曲線のほぼ水平となる範囲を含む濃度減少に、第3段よりも後の段もあずかるようになるのではないかと、という推測は当然生じる。同様に、段数を減ずれば、上でいう範囲を含む濃度減少に、第3段、次いで第2段があずからなくなるのではないかと、という推測がなりたつ。これらの推測は段数を増加せしめれば最終段濃度 x_n が減少してゆくであろうことを考慮していない点で、一見誤っているように考えられる。しかし、形式的に $n+1$ 段濃度 x_{n+1} を第2章§4で導入し、 $x_{n+1}=x_p(\text{一定})$ であつたから、段数 n を増加せしめれば、長さ一定の区間 $[x_p, x_f]$ を分割する長さ不均一の副区間数は明らかに増加する。

以下において、局所最大点の変化を求めるために、 $x_f=0.2$ で段数を变化させた場合の最適濃度分布について述べる。

計算は段数 $n=5, 7, 15, 20$ について行い、 $n=10$ の場合とあわせ比較した。

得られた最適濃度分布をFigs. 3-8〜3-12に掲げる。これらの図において、仮想的な第 $n+1$ 段をも含めている。 $(x_{n+1}=0.0213)$ 第0段(原料濃度の表示)から $n+1$ 段までの長さを n に拘りなく一定として、各段を表わす点は0段の点から $n+1$ 段の点の間を $n+1$ 等分して定めている。

Figs. 3-8〜3-12によれば、本節のはじめに述べた推測は正しかったといえよう。

段数を変えても、グループ分けは明瞭になし得る。即ち、濃度 x_i の大幅に減少する段が存在する。

入口濃度を減少せしめたときがそうであるように、段数を变化せしめた場合も、平衡曲線函数の逆数函数が水平に近くなっている点を含む濃度範囲で大幅な濃度減少をしている。即ち、副区間(3-2)のうち最大のものが上のほぼ水平な所を含むものであるということであるから、前章定理2-1の系2の要請に合致する。

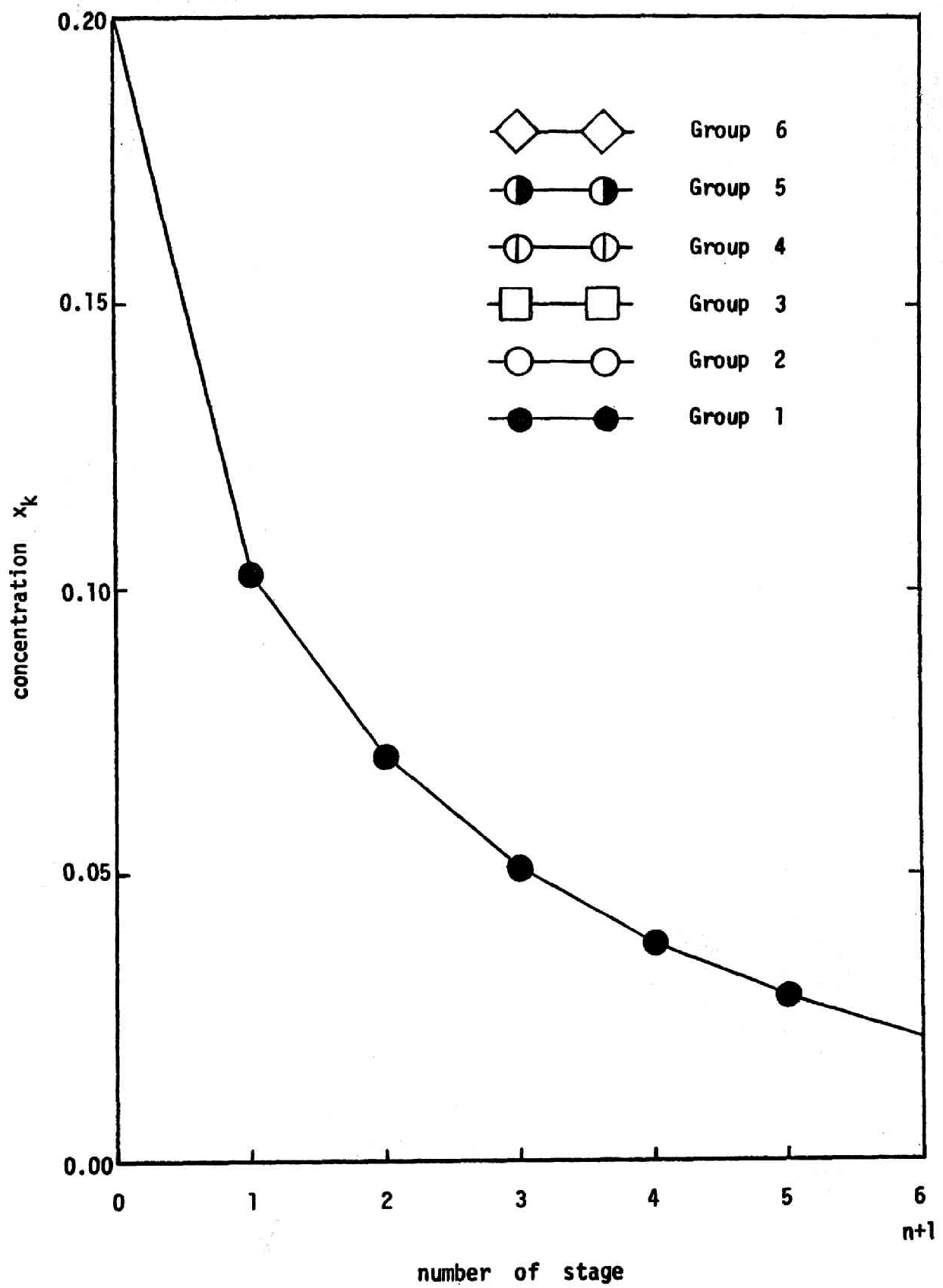


Fig. 3-8 Local optimum point for $n=5$

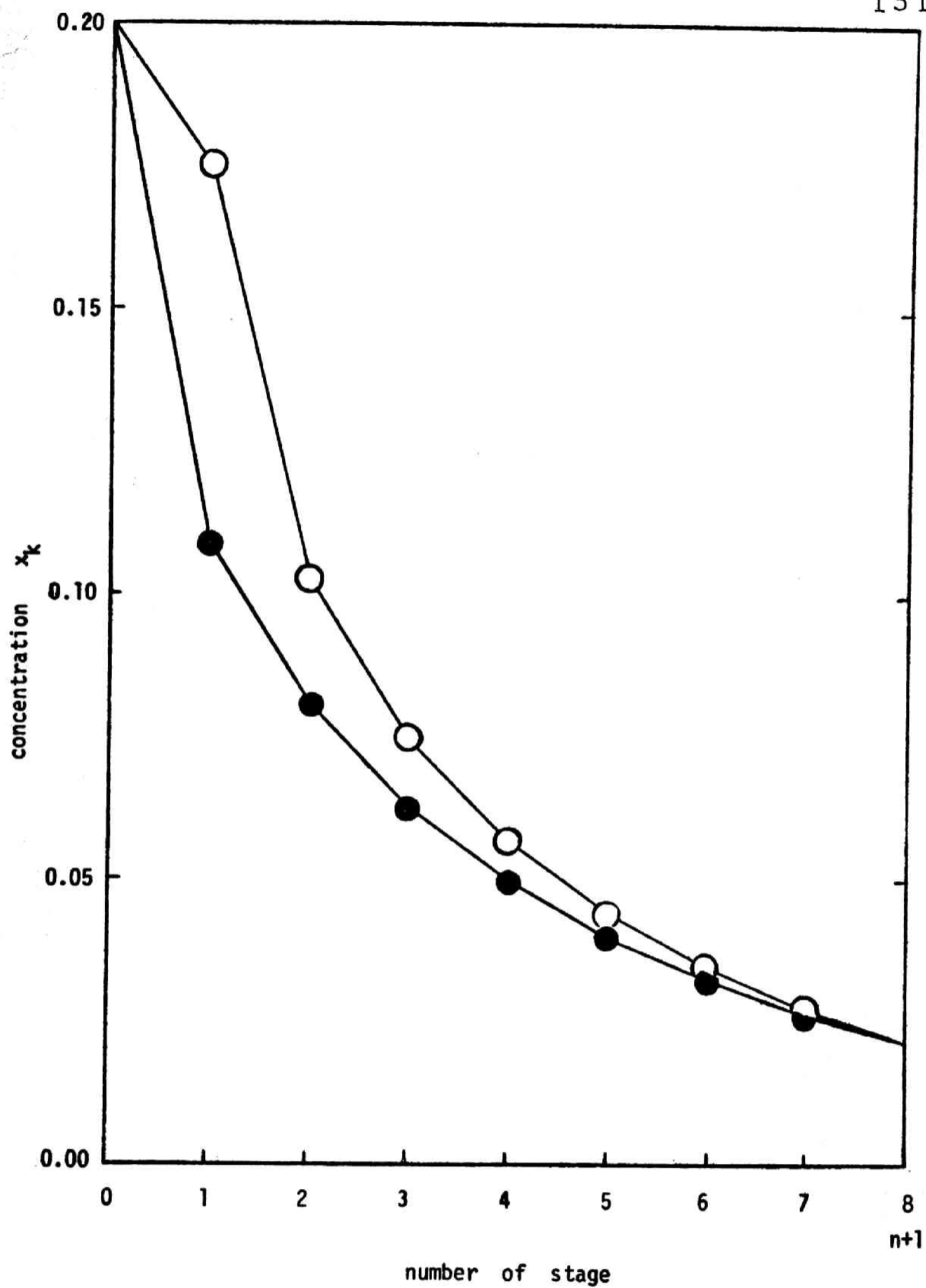


Fig. 3-9 Local optimum points for $n=7$

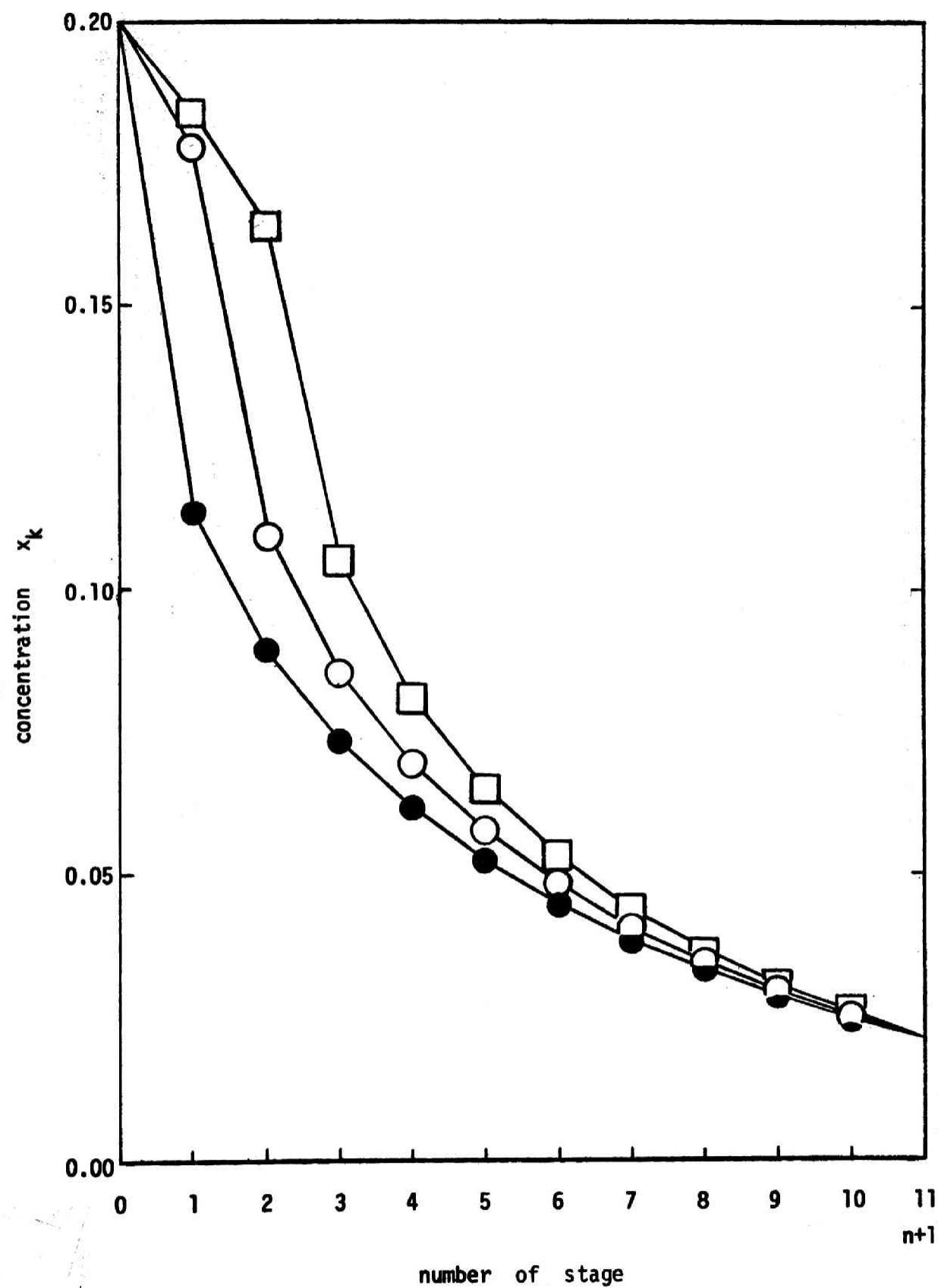


Fig. 3-10 Local optimum points for $n=10$

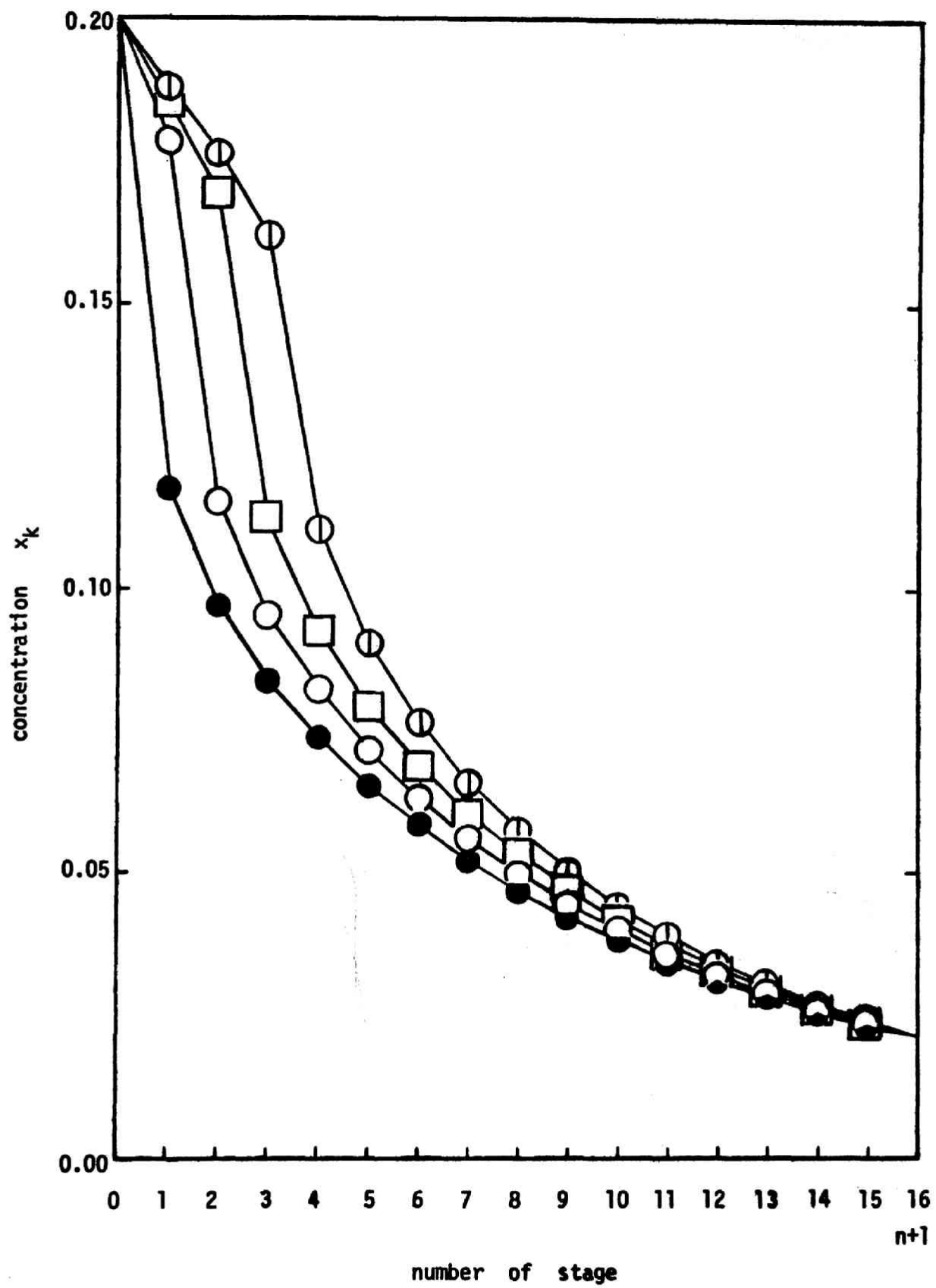


Fig. 3-11 Local optimum points for $n=15$

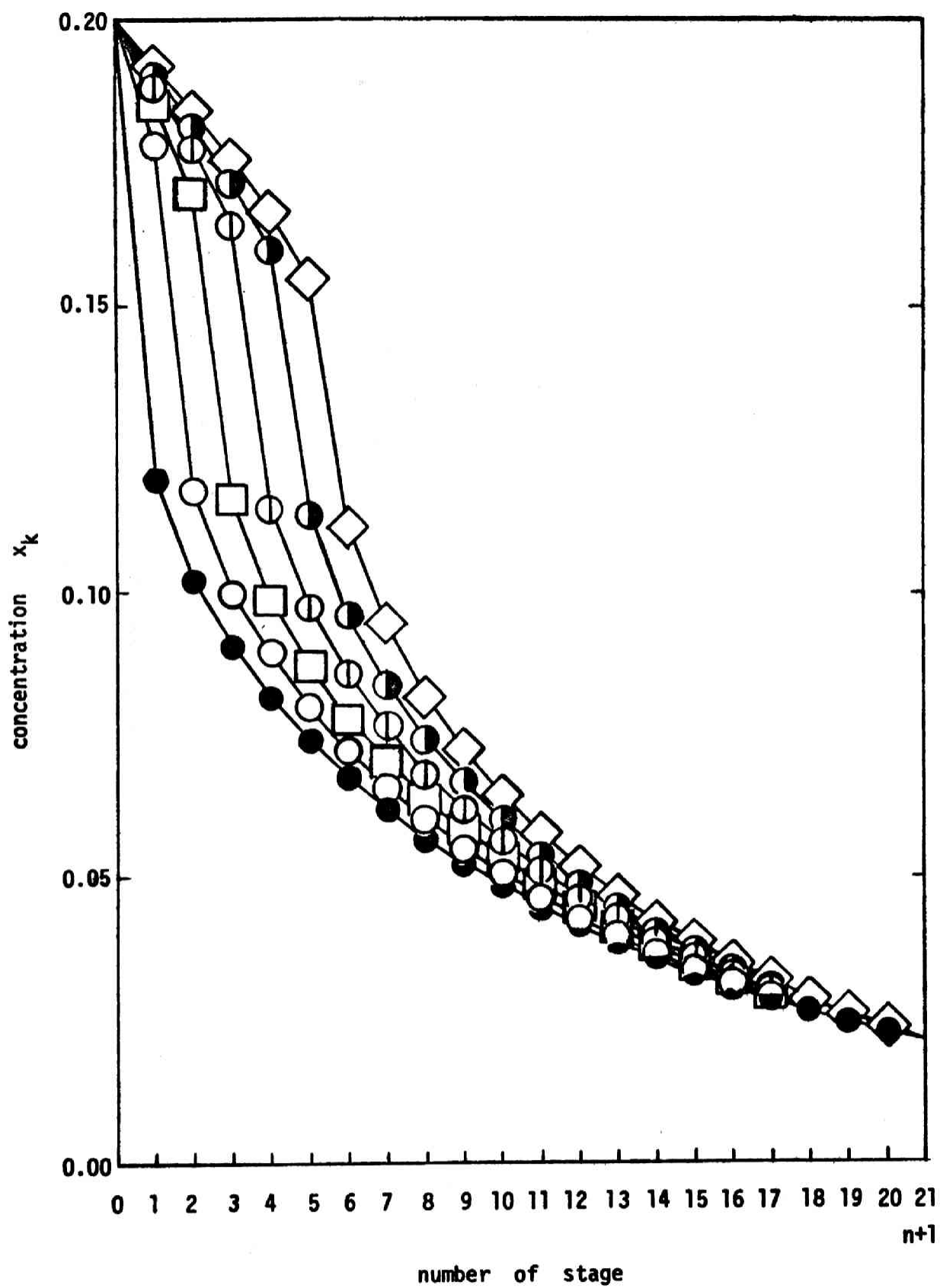


Fig. 3-12 Local optimum points for $n=20$

計算された各段数についての局所最大点と連続系での最大値をTable 3-2に掲げる。この表においてみれば、段数が増えるに従い、大域的最大点となるグループの番号が大きくなってゆく。

最後に、多段系による連続系への近似につき考える。

段数増加によって、最適値は連続系のそれに収束してゆくことがみられる。

(Table 3-2)

しからば、段数 n を増大させていったとき、すべての観点で連続系に近づくであろうか。連続系では第1溶媒濃度対第2溶媒流量(x 対 u)曲線は一意的である。しかし、さきの計算結果では、段数 n が増大したとき、上の関係を示す階段函数は各グループに対応する数だけ種類がある。即ち、段数増加に従い、局所最大点を与える階段函数は平衡曲線函数の逆数函数をよりよく近似するようになるが、そのような階段函数の数は増大して、一意にはなっていないということが計算結果から知られる。 $n \rightarrow \infty$ としたとき、最適な操作を行う限り、 $x_n \rightarrow 0$ とならない。Fig. 3-12からもうかがえるように、 $x_n \rightarrow x_p > 0$ である。このことは、連続系の最適操作が溶媒濃度を x_p にするまで第2溶媒を与えるというものであることに近づいているとみることができよう。

Table 3-2 Value of the objective function for local optimum points
with several numbers of stages, n

| <u>Group</u> | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|-----------------------|------------------|------------------|------------------|-----------|-----------|-----------|
| n | | | | | | |
| 5 | <u>0.1115254</u> | - | - | - | - | - |
| 7 | <u>0.1131215</u> | 0.1128070 | - | - | - | - |
| 10 | 0.1142778 | <u>0.1142816</u> | 0.1140369 | - | - | - |
| 15 | 0.1151451 | <u>0.1153053</u> | 0.1152695 | 0.1151638 | - | - |
| 20 | 0.1155660 | 0.1157779 | <u>0.1158051</u> | 0.1157768 | 0.1157190 | 0.1156395 |
| continuous process | 0.1173444 | | | | | |

 denotes global optimum

References

- 1 Aris, R., Rudd, D.F., and Amundson, N.R.: On optimum cross-current extraction, Chemical Engineering Science, Vol.12, 1960, pp.88-97.
- 2 Rosen, E.M.: Further comments on the paper: optimum cross-current extraction with product recycle, Chemical Engineering Science, Vol.19, 1964, pp.999-1001.
- 3 Lee, E.S.: Optimization by a gradient technique, I&EC Fundamentals, Vol.3, 1964, pp.373-380.
- 4 Davidson, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 5 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.

第4章 多段十字流抽出プロセスの最適化問題 における感度解析

§1 序

第I篇第4章において、Davidon-Fletcher-Powell法(DFP法)^{1,2}の感度解析法への著者による拡張法³を与えた。本章ではこの感度解析法を、第2章第3章で論じている抽出プロセスの最適化問題に適用した例を掲げる。

本章の意図の一部は、化学プロセスへの感度解析法の応用例を示し、かつ抽出プロセスの感度について考察することにある。さらに、新しく提出された感度解析法について、第I篇において何等数値例を与えていないので、ここにおいて例をあげ、感度解析法が数値的にも良い成績をあげることを例示することも意図されている。

§2 感度解析計算

第2章に与えた抽出プロセスについての最適化問題を感度解析の対象とする。第2章§2にあるように状態変数に関する最適化問題とする。この抽出プロセス最適化問題の感度解析は、他の方法によってもなされている。⁴

平衡曲線は第3章§2に与えたものを用いる。また、価格比 $\rho = 0.05$ とする。

段数10, 入口濃度 $x_f = 0.2$ とするとき、第3章に述べたように、局所最大点は3個ある。この3個の局所最大点のうち、第3章でグループ2に属するとした点について感度解析する。

Fig.4-1に与えたP1, P2なる点を探索出発点として、DFP法で最大点を求める。このとき、共にFig.4-1中 x^e なる点に到達した。到達したときのDFP法の H^e 行列をそれぞれP1, P2から出発したものについて、 H_1^e, H_2^e とする。

H_1^e, H_2^e についてその固有値 λ_j と固有ベクトル $v_j, j=1, \dots, n$ を計算した。 $(H_1^e)^{-1}, (H_2^e)^{-1}$ の固有値 $1/\lambda_j$ をFig.4-2に、又、固有ベクトルをFig.4-3, Fig.4-4に掲げる。いずれも、 $(H_1^e)^{-1}, (H_2^e)^{-1}$ についてのものが互いに良く一致している。

第I篇第4章(4-6)に与えた函数

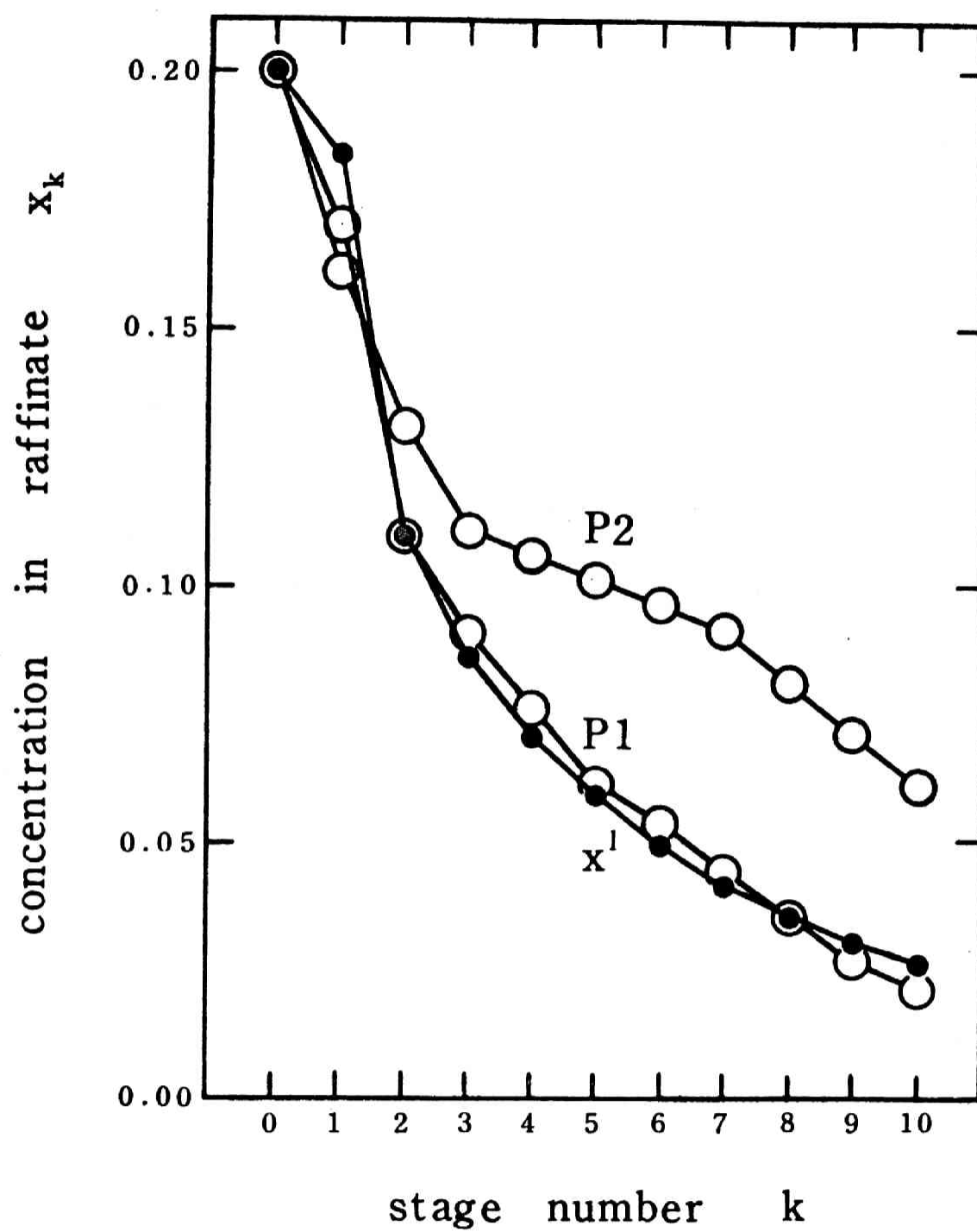


Fig. 4-1 Starting points, P1 and P2, and the attained local optimum point, x^1

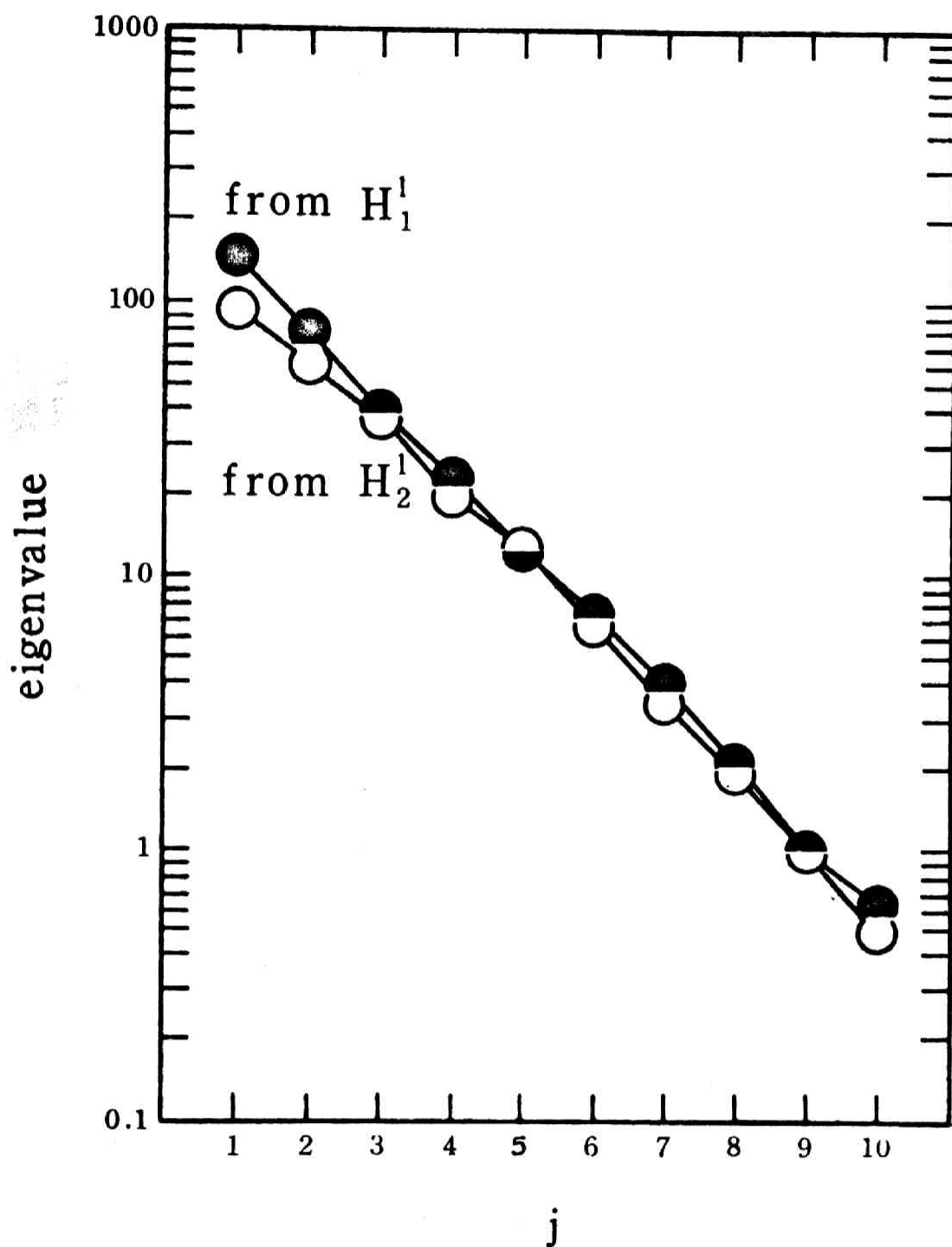


Fig. 4-2 Eigenvalues, $1/\lambda_j$, $j=1, \dots, 10$, for the matrices, $(H_1^1)^{-1}$ and $(H_2^1)^{-1}$, computed from H_1^1 and H_2^1

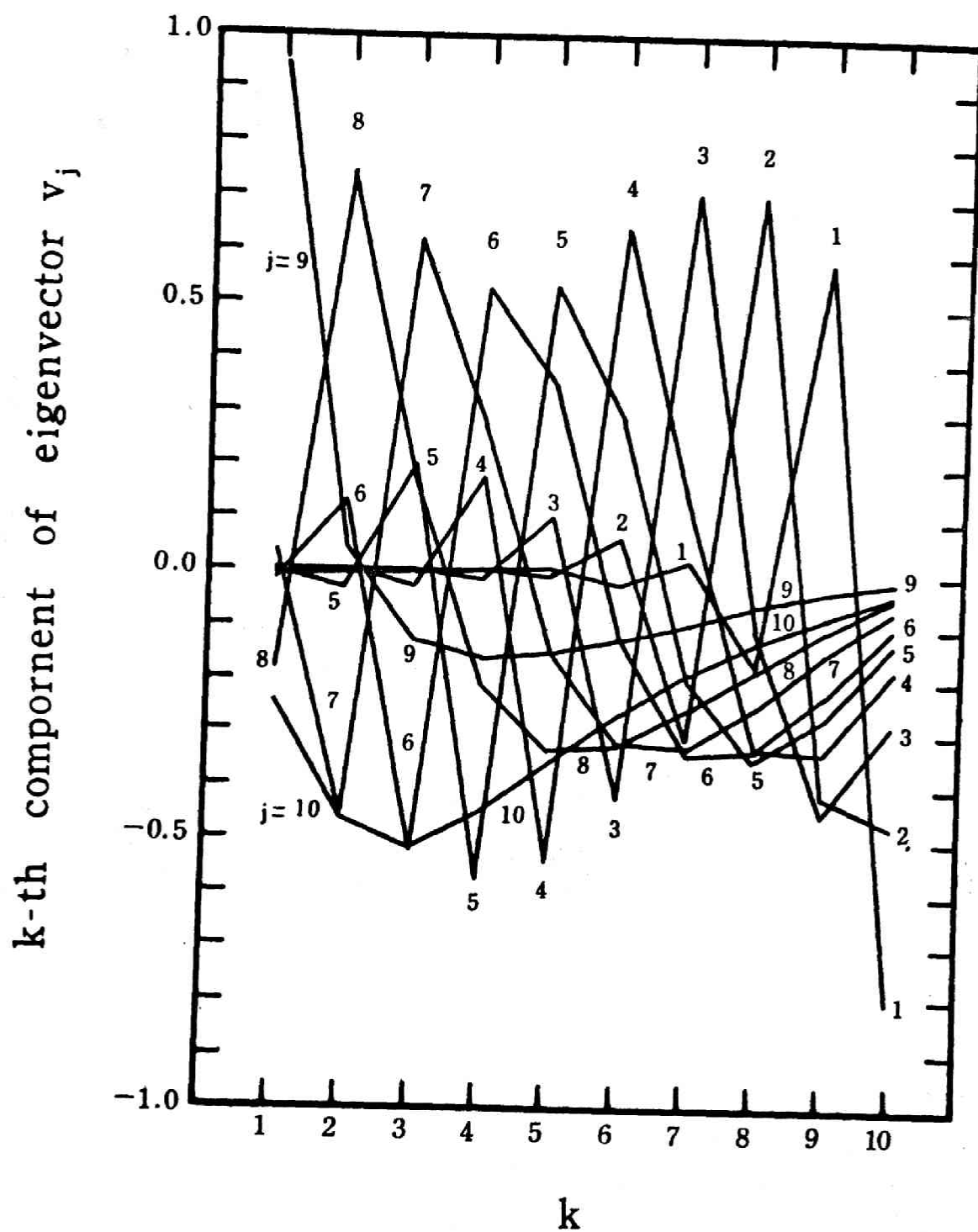


Fig. 4-3 Eigenvectors, v_j , $j=1, \dots, 10$, for the matrices, H_1^1 and $(H_1^1)^{-1}$

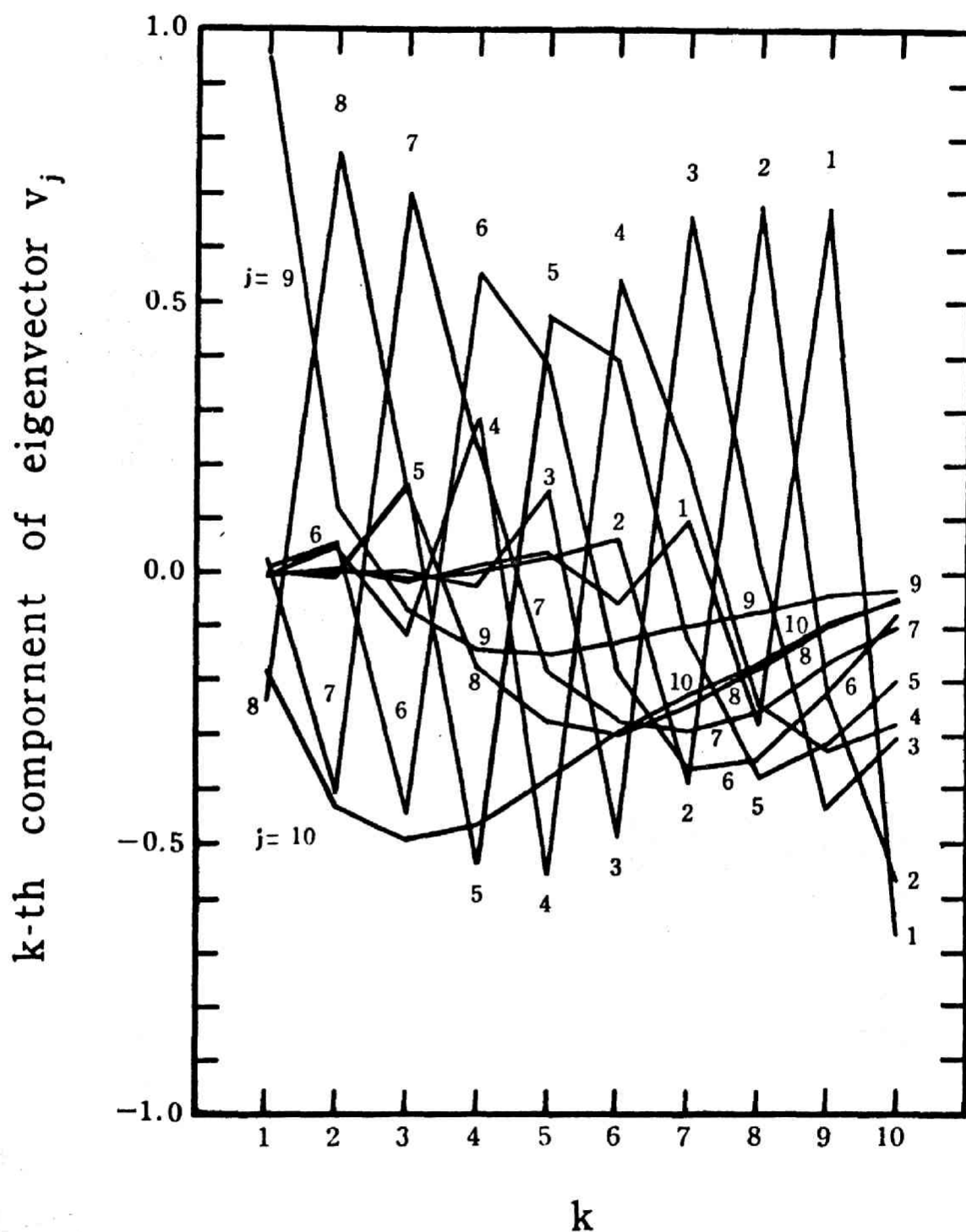


Fig. 4-4 Eigenvectors, v_j , $j=1, \dots, 10$, for the matrices, H_2^1 and $(H_2^1)^{-1}$

$$F_S(x) = \frac{1}{2}(x-x^*)^T(H^S)^{-1}(x-x^*) \quad (4-1)$$

の値を, $x^* = x^e$ とみなすことによって, 同所(4-17)の式

$$F_S(x) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\lambda_1} (v_1^T(x-x^e))^2 + \frac{1}{\lambda_2} (v_2^T(x-x^e))^2 + \dots + \frac{1}{\lambda_n} (v_n^T(x-x^e))^2 \right\} \quad (4-2)$$

を用いて, 固有ベクトルの方向に沿って計算した。その値は同所(4-18)の函数 $f(x)$ は目的函数)

$$F_e(x) = f(x) - f(x^e) \quad (4-3)$$

の値と, 点 x^e から 0.01 の距離までよく一致している。(Fig. 4-5, Fig. 4-6) このことは, $F_S(x)$ と $F_e(x)$ のよい一致を示すのみならず, x^e が真の局所最大点であることを示す。

Figs. 4-5, 4-6 における *印は不等号束縛条件(2-1)を満たさない抽出プロセスとして意味のない点であることを示す。

k 段の第 1 溶媒中の単位濃度変化, 即ち,

$$|x_k^e - x_k| = 1, \quad x_j^e - x_j = 0, \quad j \neq k \quad (4-4)$$

についての目的函数の感度を Fig. 4-7 に示す。

§3 検 討

第 I 篇第 4 章に与えた感度解析法が, この例において良い成績をあげていることは, Figs. 4-5, 4-6 からわかる。

このプロセスの最適化問題についていえば, 第 2 章に述べたように 2 階偏導函数の式を導くこと自体は比較的簡単であり, Hessian 行列も 3 重対角行列となるので, 行列要素の値の計算は他の一般プロセスに比較すれば簡単といえよう。しかし, 次章に述べるように, 局所最大点を求める上で, DFP 法は極めて有効であるので, 感度解析を行うに当って, Hessian 行列を直接計算してこれを用いるよりも, DFP 法の拡張法によって行った方が, 計算上有利であろう。

より一般的プロセスについては, Hessian 行列の式を導き出すこと自身が遙かに面倒になるので, DFP 法による感度解析は更に有効となる。

Fig. 4-7 によると各段濃度変化に対する目的函数の感度はうしろの段に行く

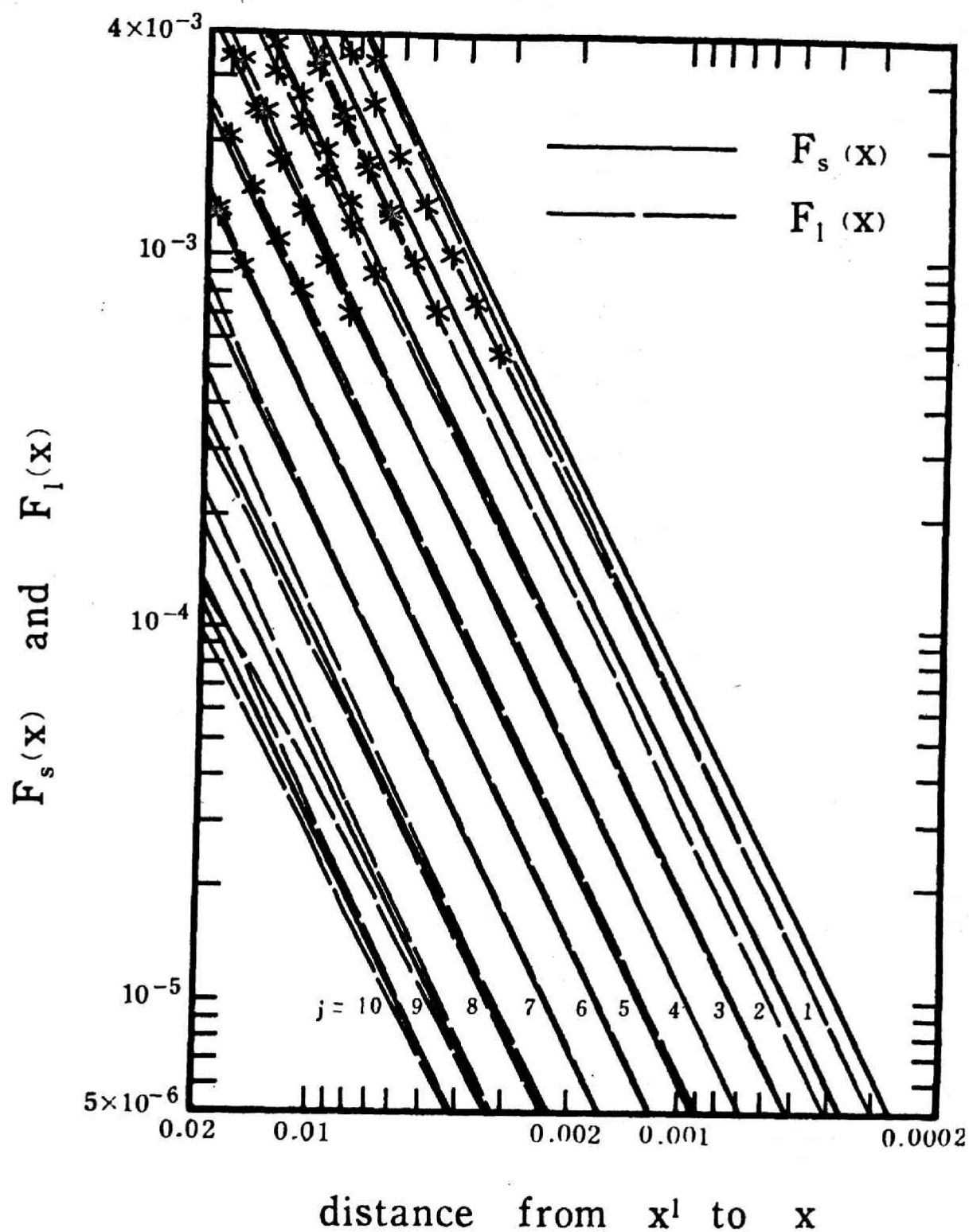


Fig. 4-5 Values of $F_s(x)$ and $F_1(x)$ for H_1^1 , where $x = x^1 + cv_j$, $j = 1, \dots, 10$, $c > 0$, and * denotes the point which has no physical meaning

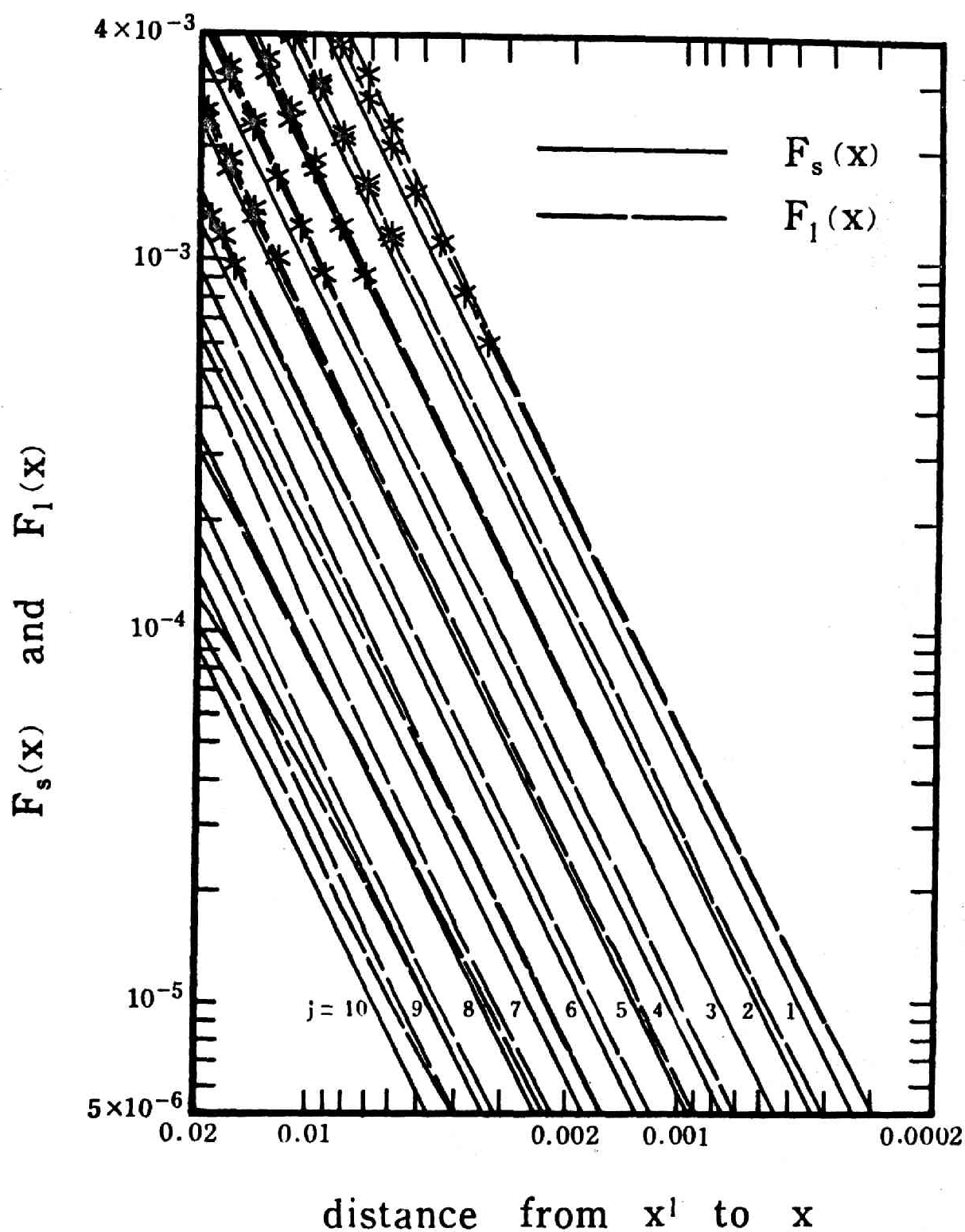


Fig. 4-6 Values of $F_s(x)$ and $F_1(x)$ for H_2^1 , where $x = x^1 + cv_j$, $j=1, \dots, 10$, $c>0$, and * denotes the point which has no physical meaning

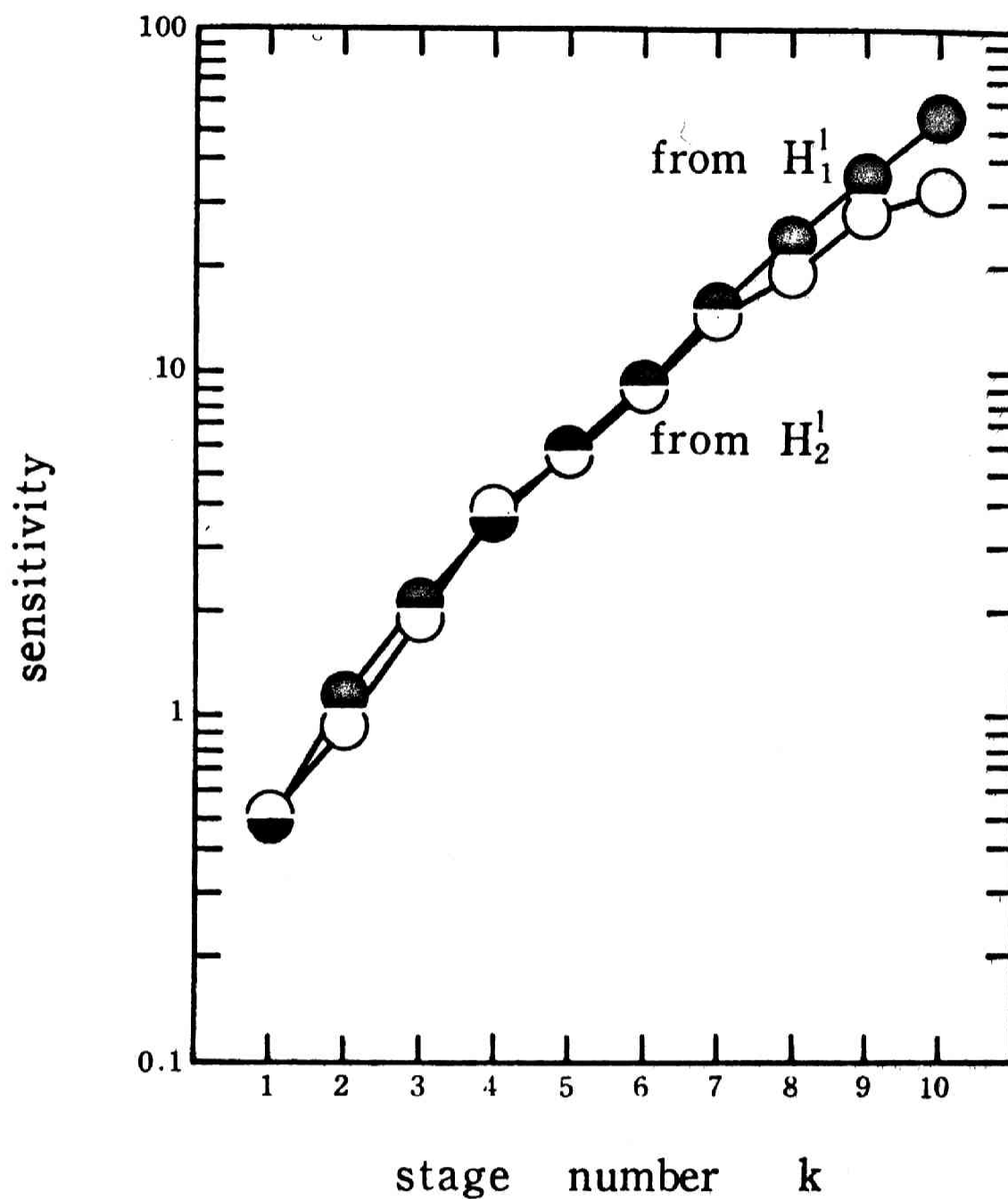


Fig. 4-7 Sensitivity computed from H_1^1 and H_2^1 for unit change of concentration in k -th stage raffinate, x_k , i.e. $F_s(x)$ value for $|x_k^1 - x_k| = 1$, $x_m^1 - x_m = 0$ $m \neq k$, $k = 1, \dots, 10$

につれて高くなっている。 x^e の各成分の値をFig. 3-1の上にとって、第2章3.5の議論を参照すれば、目的函数の中に占める段当りの利益が少ない段についての方が、微小濃度変化が目的函数に強い影響を与えていることがわかる。

また、 x^e が前章でいうグループ2の点であって、 $|x_2^e - x_1^e|$ が他の $|x_i^e - x_{i-1}^e|$, $i=1, 3, \dots, n$ に比較してかなり大きいのであるが、Fig. 4-7にみる各段濃度変化に対する感度のグラフがほぼ直線状になっていることは興味深い。

References

- 1 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 2 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 3 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: An extension of the Davidon-Fletcher-Powell method to sensitivity analysis, (未発表).
- 4 Takamatsu, T., Nakanishi, E., and Hashimoto, I.: Optimal control and its sensitivity for a multi-stage process, Third Congress of IFAC, 1966, Paper 19.F.

第5章 多段十字流抽出プロセスの最適化計算法

§1 序

第3章における多峰性の解析をするために局所最大点を計算する方法として、また、第4章における感度解析をも含めた最適化計算において、Davidon-Fletcher-Powell法(DFP法)^{1,2}を用いた。

第I篇において述べたように共軛方向法のひとつであるDFP法は、少ない探索繰返しで解に到達しうると期待することができる。実際、DFP法の収束の速いことについては、以下に抽出プロセス最適化に適用したときの他法との比較例を挙げる。この例においては同じく共軛方向法でありながら、Fletcher-Reeves法(FR法)³は、同一の最適化問題について最急上昇法よりも遅い収束を示すことがある。

また、DFP法で計算するときFletcher & Powellの原報²通りの計算式を用いると数値的不安定性を起す場合があることは、第I篇第3章に述べた。

抽出プロセスの最適化問題では、状態変数、即ち、目的函数の独立変数に束縛条件が存在しているので、その処理方法についても述べなければならない。

以下の節においては、DFP法、FR法、最急上昇法を、第2章から第4章で扱った抽出プロセス最適化問題に適用したときの、収束の速さの比較、DFP法の数値誤差に由来する不安定性の発生例、DFP法の最大化問題の解法への書きかえについて述べる。さらに、抽出プロセス最適化問題の不等号束縛条件の処理法について述べ、また平衡曲線の詳細について検討を行う。

§2 収束の速さの比較

この節では、DFP法、FR法、最急上昇法の最適解への収束の速さを比較する。^{4,5} 最大化すべき函数は第2章から第4章まで扱ってきた抽出プロセス最適化問題の目的函数であり、平衡曲線、価格比は第3章§2に述べてあるものと同じであるとする。また、入口濃度 $x_f = 0.2$ 、段数10について計算した結果を比較する。

1次元探索法は、この節での比較のための計算においては、第I篇第1章§5に述べたバイナリー法か、これに放物線内挿を追加したものに依っている。

$t=0$ 、即ち、リサイクルのない場合について、Fig.5-1の出発点から探索を

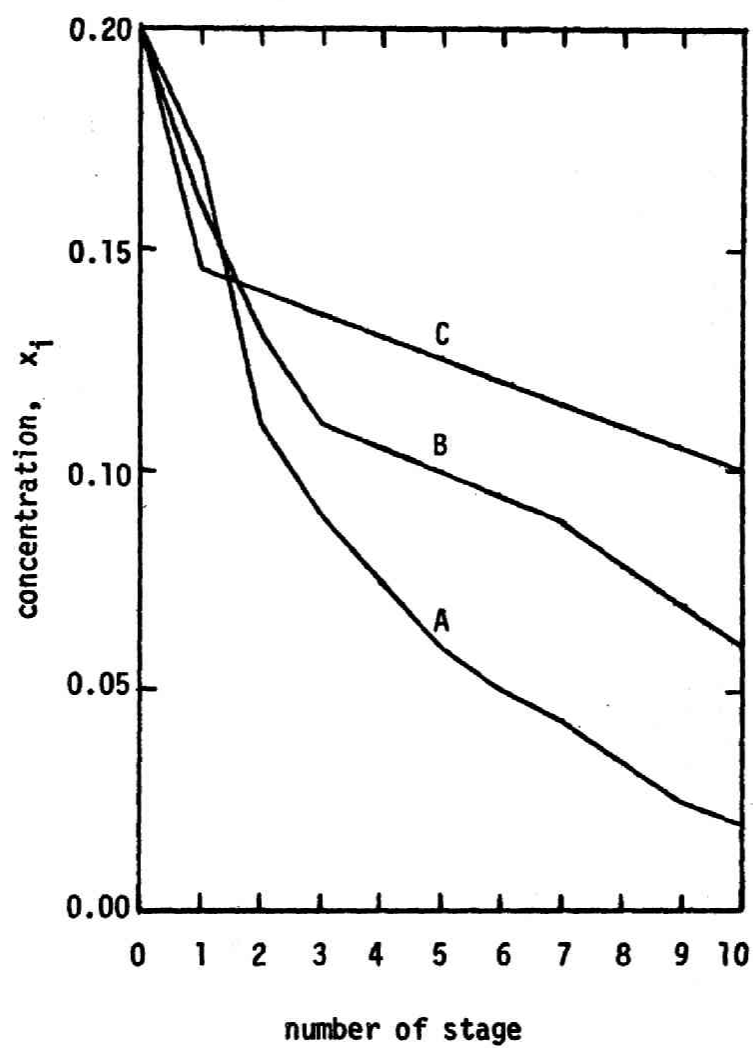


Fig. 5-1 Starting points for $r=0.0$, $x_f=0.2$

はじめに、DFP法、FR法、最急上昇法によって最大化するときの、目的函数値対探索繰返し回数との関係をFigs. 5-2, 5-3, 5-4に掲げる。Fig. 5-1中のA, B, Cから出発したとき、それぞれ、第3章にいう、グループ2, グループ3, グループ2の最大点(Fig. 3-2)に収束した。

Figs. 5-2 ~ 5-4によれば、DFP法はつねに最も少ない探索繰返し回数で最大点に到達している。対象としている目的函数の独立変数の個数は10であるが、これら図に掲げられた例では、20回ほどの探索繰返しの後、目的函数値が十進9桁まで一致した。

Fig. 5-2に示した例は、グループ2の局所最大点の近くから出発して、その局所最大点に近づいていく例であるが、FR法はDFP法に次いで良い成績をあげており、放物線近似を伴う1次元探索法により、かなり収束が速くなっている。Figs. 5-3, 5-4の例では、出発点B, Cはそれぞれの近づいてゆく最適点から比較的遠い。このとき、FR法は共軛勾配法の一般化された方法でありながら、最急上昇法よりも解への到達が遅い。

もとより、共軛方向法が変数の数と等しい探索繰返し回数で解に到達することは、2次形式目的函数のときに誤差のない計算について保証されたものであった。そして、一般の非線型目的函数について、収束の速いことの期待しうるのは、解の近傍でTaylor級数展開の3次の項以下の無視しうる場合に限られるはずのものであった。しかし、同じ共軛方向法であるDFP法とFR法が同じ点から出発して、この同じ非線型目的函数につき解への収束の速さが全く異なっていて、FR法が最急上昇法にある成績しかあげえないことがあることは、興味深い。第7章では、函数空間における最適化において、DFP法が最急降下法にある成績しかあげえない計算例を示す。これと合せ考えると、共軛方向法が速く収束するということは、全く初めて扱う目的函数に対しては、あくまでも期待として言うにすぎないこととなる。

1次元探索をバイナリー法に放物線近似を付加して行った方が、バイナリー法のみによるより、DFP法、FR法は良い成績を挙げている。(Fig. 5-2)

これは、次の理由で、当然といえる。即ち、両法が共軛方向法であって、 n 回での収束を証明する際に、1次元探索は探索方向で函数を最小(最大)にする点を誤差なく求めるように行っているからである。

最急上昇法については、放物線近似を付加して1次元探索をより精密に行うことは、かえって悪い結果をもたらしている。(Fig. 5-2) このことについては、Booth⁶によっても論じられている。最急上昇法においては、より多くの計算プログラムを用意し、より多くの演算時間を費して全計算過程の一部たる1次元探索で精密な計算をすることが、かえって悪い結果をもたらしていることになる。

最急上昇法のための1次元探索において、放物線近似を附加することが不適

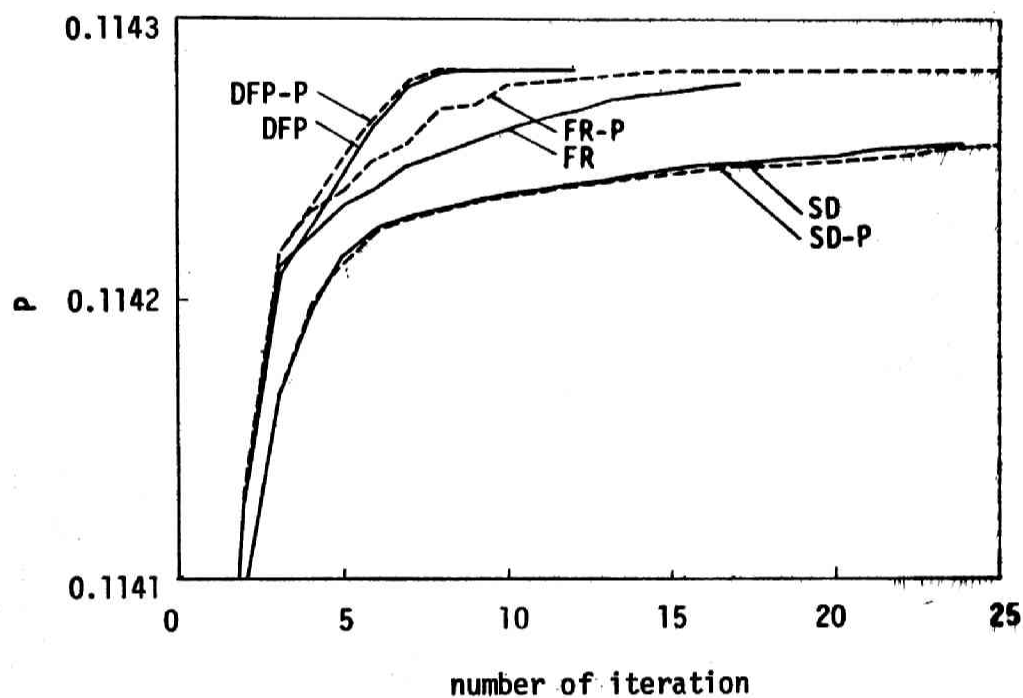


Fig. 5-2 Behaviour of objective function starting from point A

DFP : Davidon-Fletcher-Powell method
 DFP-P : DFP method with parabolic approximation
 FR : Fletcher-Reeves method
 FR-P : FR method with parabolic approximation
 SD : Steepest descent method
 SD-P : SD method with parabolic approximation

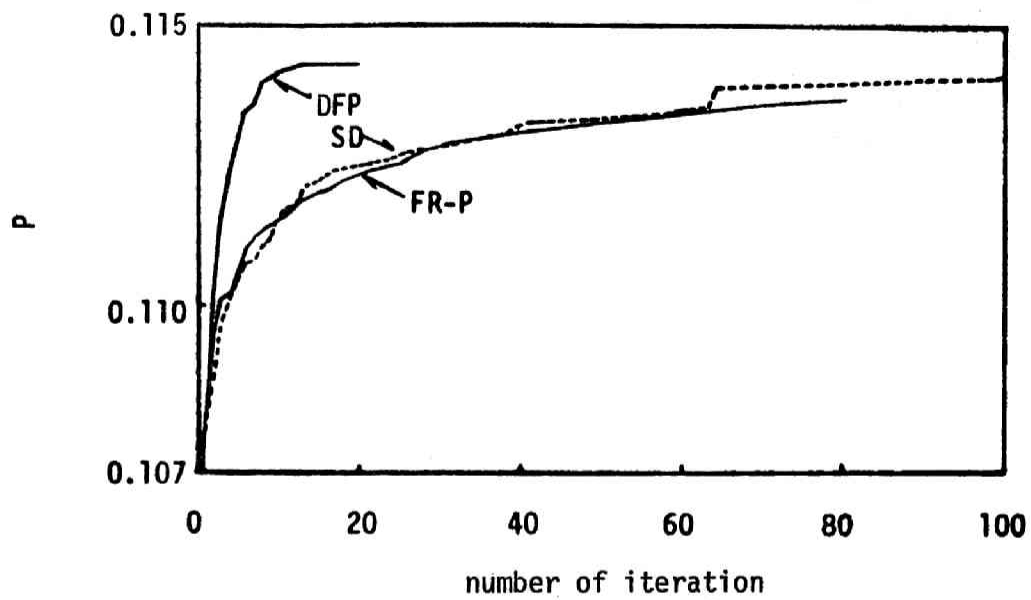


Fig. 5-3 Behaviour of objective function starting from point B

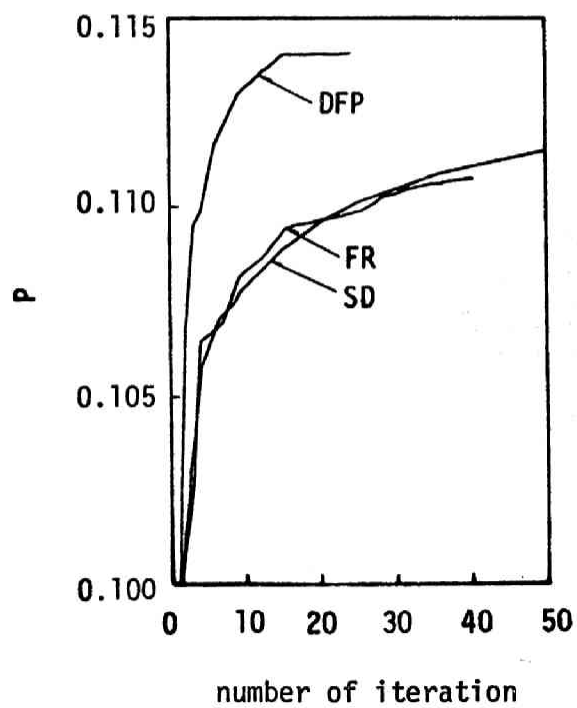


Fig. 5-4 Behaviour of objective function starting from point C

当であるということは、第I篇第1章でふれたグラジエント法の1次元探索方向決定法と1次元探索法との任意の組合せが不可であることの例となっている。

探索繰返し回数についての最適解への接近の速さのみを論じることは、不十分であるので、各グラジエント法の1回の探索に費す計算時間を比較する。ここで対象としている目的函数については、1回の探索繰返しについてDFP法は、他の2法の1.5倍の時間を必要としたのみである。

また、DFP法は、FR法、最急上昇法に較べて、 H 行列のため、少なくとも $n(n+1)/2$ 個、その他にベクトルのための記憶量を他2法よりも多く必要とする。

さて、上に見たように、DFP法はここで扱っている最適化問題に対し、かなり強力な方法である。この強力さは、第3章の多峰性に関する研究のための数値計算遂行上、他2法に較べ、絶対的威力を発揮する。グラジエント法によって多峰性の解析のため局所最大(小)点を求めようとするならば、多くの探索出発点をとって、それらについて計算手順を実行しなければならない。第3章にみられた計算例における多数の局所最大点を見出すためには、局所最大の確認も兼ねて、最大点の個数の数倍の出発点をとって計算を行った。この例のように、探索出発点を多数とって、それらについて計算手順を実行するとき、DFP法を採用した場合と、FR法ないし是最急上昇法を用いた場合との所要計算時間の差(比ではなく)がDFP法の意義を決定的なものにする。

更に、第2章における議論も、抽出プロセスの最適化問題についての数多くの数値実験の結果から推測された事項を検討して引出されたものである。「実験装置」たるグラジエント法が鋭敏、迅速であれば有利なることは論を待たないであろう。

§3 Davidon-Fletcher-Powell 法の数値誤差に由来する不安定性の発生例

DFP法が、理論上安定な最小化手法であることは、第I篇第3章§3に述べた。更に同所で、この理論が数値計算上のいかなる誤差もないことを前提として築かれており、実際の計算では1次元探索になにがしかの誤差を含むことから、試行点間距離 $\|x^i - x^{i-1}\| = \|0^{i-1}\|$ を過小に評価したとき、不安定となりうることを述べている。

実際、抽出プロセス最適化問題を解くにあたって、Fletcher & Powell の原報²通りの H^i 行列修正式に従って計算プログラムを作ったとき、このような

不安定現象がみられた。⁴即ち、リサイクルを有する($t=0.2$)ほかは前節と同じ条件の問題に対して、Fig. 5-5 に掲げる 2つの点B, Cから出発して探索を行ったとき、探索手順実行中に探索方向決定行列 H^i が正定値でなくなり、不安定となってDFP法の計算を続けることができなくなった。

H^i 修正式における A^i 項を第I篇第3章の(3-45)によるとき、上の不安定現象は除かれた。(3-45)を用いることの有効性について、次に2例を挙げておく。

Fig. 5-5のB点を出発点として、Fletcher-Powellの原報²通りの式により H^i 修正プログラムを組んだとき、23回目の繰返しで H^i が正定値でなくなったため不安定となった。22回目の試行点 x^{22} を改めて出発点 x^0 とし、また、 $H^0=E$ として計算したとき、更に13回の繰返しで解に到達した。一方、数値誤差を伴っても安定となる第I篇(3-45)を用いたとき、B点から出発して30回の探索繰返しの後、解に到達した。

また、Fig. 5-5の点Aから出発したとき、原報通りのプログラムでも解に到達し、所要繰返し数は30であった。 A^i を第I篇(3-45)によったプログラムを用い、同じ出発点から計算したとき、1回多い繰返しを要するのみであった。

§4 最大化問題のためのDavidon-Fletcher-Powell法

目的函数 $f(x)$ の最大化問題は、 $-f(x)$ の最小化問題として、DFP法によって解くことができる。

直接、最大化問題のままで解くとき、DFP法は次の形に書き直せる。第I篇第3章と対照して、第I篇(3-33), (3-34), (3-35)のうち、(3-34)の符号を変える。

$$A^{i-1} = - \frac{\sigma^{i-1} \sigma^{i-1 T}}{\sigma^{i-1 T} \gamma^{i-1}} \quad (5-1)$$

探索方向 d^i は第I篇(3-32)の符号を逆にして、

$$d^i = H^i g^i \quad (5-2)$$

上のことの証明は容易にできるが、単に探索方向を求める式、第I篇(3-32)の符号を換えるだけでなく、 A^i の符号も換えなければならないことは、注意を要する。§3の議論は、そこでは最大化問題を考えているので、実は(5-1)の A^i

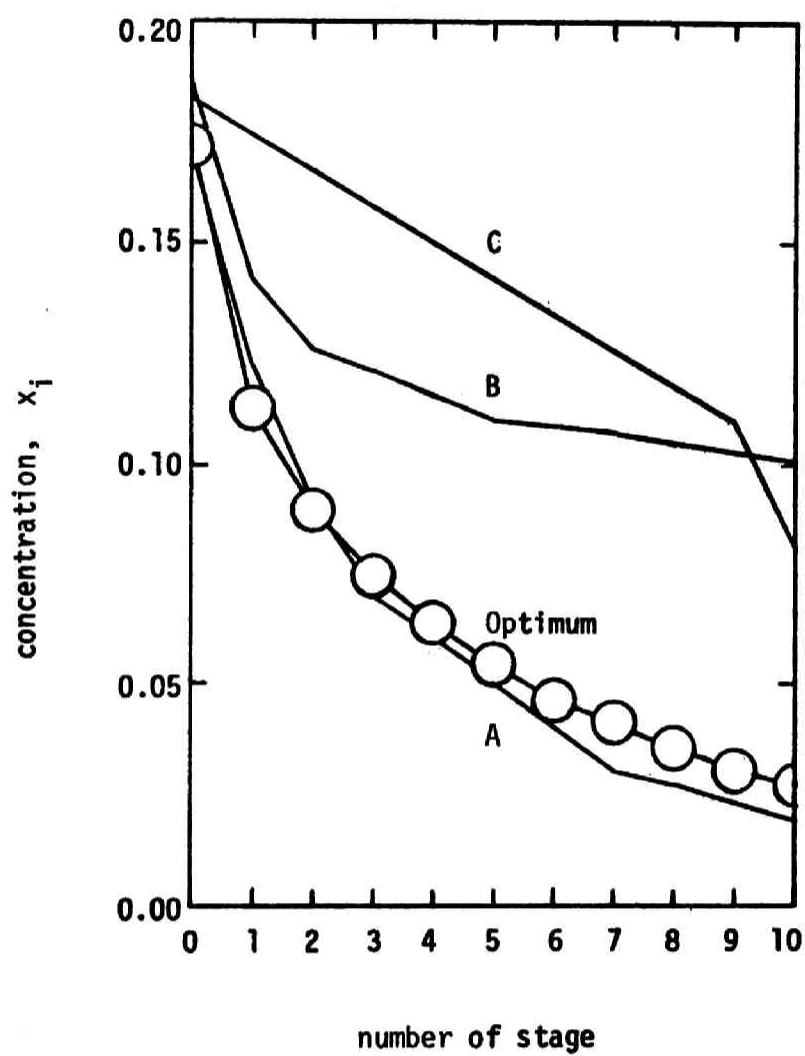


Fig. 5-5 Optimum and starting points for $r=0.2$, $x_f=0.2$

について行われるべきものであった。

§5 不等号束縛条件の処理

第2章から本章までで扱う多段十字流抽出プロセスの最適化問題には、抽出プロセスの操作上の意味から定まる不等号束縛条件(2-1)が課せられている。最適化問題としては、(2-1)は(2-34)によっておきかえられることも既に述べた。

(2-34)を一般化された問題に対して書きなおせば、不等号の向きを逆にして

$$x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n < x_p = x_{n+1} \quad (5-3)$$

以下、一般化された問題である(2-40)の目的函数に負号をつけた、最小化問題を考える。

$$P_- = - \sum_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{p} - \Phi(x_i) \right) (x_i - x_{i-1}) \quad (5-4)$$

$1 \leq i \leq n+1$ なる i のうち、(5-5)を満たすものの集合を I_1 、(5-6)を満たすものの集合を I_2 とする。

$$x_{i-1} = x_i \quad (5-5)$$

$$x_{i-1} < x_i \quad (5-6)$$

定理 5-1

I_1, I_2 が共に空でなく、

$$I_1 \cup I_2 = \{1, 2, \cdots, n, n+1\} \quad (5-7)$$

なる任意の点を \bar{x} とする。このとき、(5-3)と次式とを満足し、しかも点 \bar{x} にかようにでも近い点 \hat{x} をとることができる。

$$P_-(\hat{x}) < P_-(\bar{x}) \quad (5-8)$$

ただし、函数 $\Phi(x)$ は狭義の単調増加函数とする。

定理5-1によって, P_- の最小化問題の束縛条件(5-3)を次式でおきかえたとき, 局所最小点は(5-3)を満足し, (5-3)と(5-9)をいれかえても最適解は同じであることがいえる。

$$x_0 \leq x_1 \leq \cdots \leq x_{n-1} \leq x_n \leq x_p = x_{n+1} \quad (5-9)$$

また, 定理5-1において, I_2 が空の場合を排除しているのは, I_2 が空のとき, $x_0 = x_{n+1}$ であるからである。

定理5-1は, 図形より直観的に理解される。(Fig.5-6) 定理5-1を以下に証明する。

$$\frac{\partial P_-}{\partial x_i} = \frac{d\Phi(x_i)}{dx} (x_i - x_{i-1}) - (\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_i)) \quad (5-10)$$

ある \bar{x} について, $k+1, k+2, \dots, k+j-1, k+j \in I_1$ ($j \geq 1$), かつ $k, k+j+1 \in I_2$ とする。 $k+j = n+1$ でない限り,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_-(\bar{x})}{\partial x_{k+j-1}} &= \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \Big|_{x_{k+j-1}} (x_{k+j-1} - x_{k+j-2}) \\ &\quad + \Phi(x_{k+j-1}) - \Phi(x_{k+j}) \\ &= \Phi(x_{k+j-1}) - \Phi(x_{k+j}) \\ &< 0 \end{aligned} \quad (5-11)$$

また, $k=0$ でない限り,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_-(\bar{x})}{\partial x_k} &= \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \Big|_{x_k} (x_k - x_{k-1}) \\ &\quad + \Phi(x_k) - \Phi(x_{k+1}) \\ &= \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x_k} (x_k - x_{k+1}) \\ &> 0 \end{aligned} \quad (5-12)$$

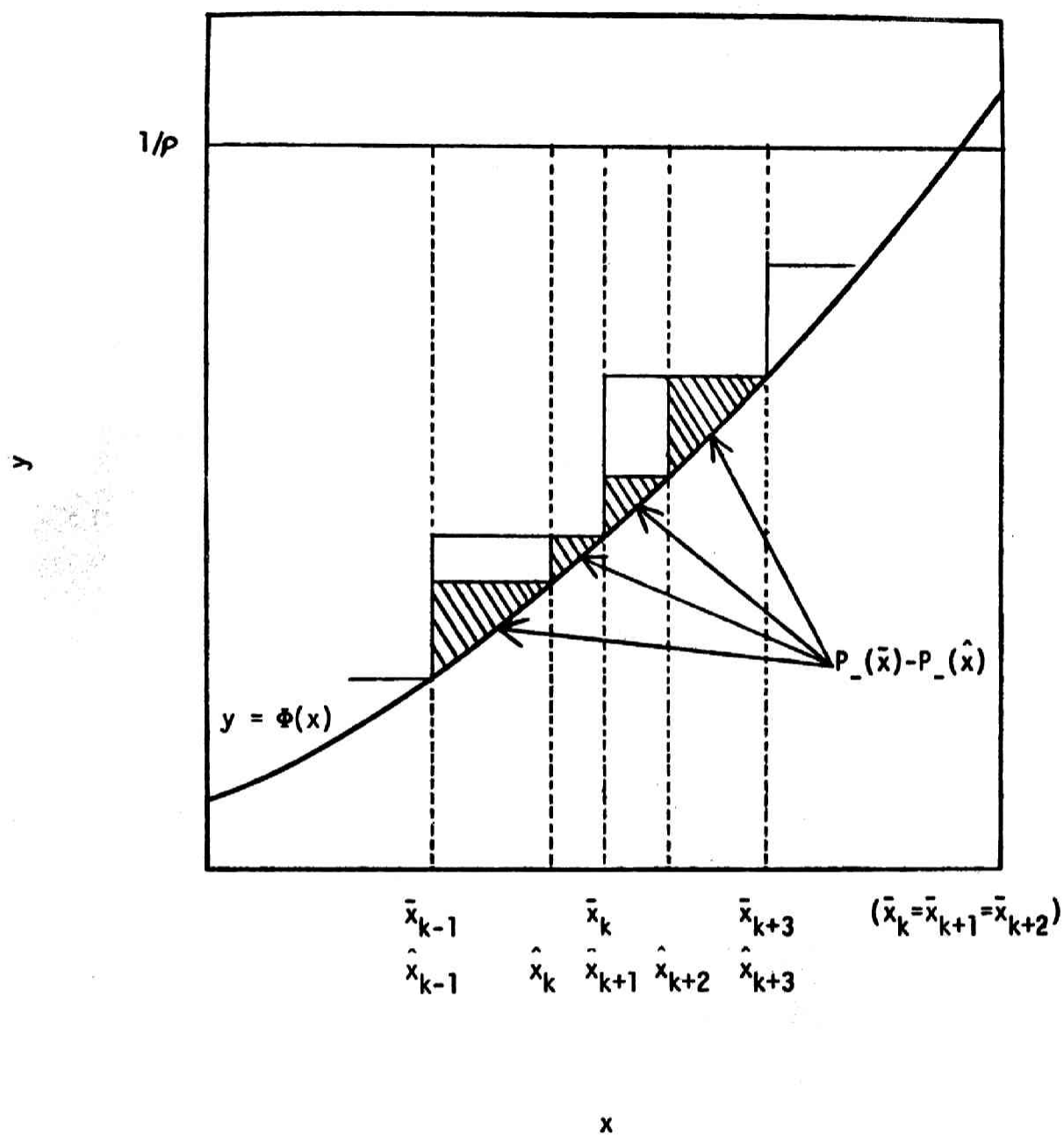


Fig. 5-6 Graphical interpretation of the Theorem 5-1

I_2 が空でないことから, (5-11), (5-12)のいずれかはなりたつ。

$$\begin{aligned} x = & (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_{k+1} - \Delta x_{k+1}, \bar{x}_{k+2}, \dots, \\ & \bar{x}_{k+j-1}, \bar{x}_{k+j} + \Delta x_{k+j}, \bar{x}_{k+j+1}, \dots, \bar{x}_n)^T \\ & \Delta x_{k+1} > 0, \quad \Delta x_{k+j} > 0 \end{aligned} \quad (5-13)$$

なる点 x をとるとき, $\Delta x_{k+1}^2 + \Delta x_{k+j}^2$ を充分小にとれば,

$$\begin{aligned} P_-(x) - P_-(\bar{x}) & \doteq -\Delta x_k \frac{\partial P_-(\bar{x})}{\partial x_k} + \Delta x_{k+j-1} \frac{\partial P_-(\bar{x})}{\partial x_{k+j-1}} \\ & < 0 \end{aligned} \quad (5-14)$$

この x については, $k+2, k+3, \dots, k+j-1 \in I_1$, $k+1, k+j \in I_2$ である。この操作をくり返せば, (5-3)を満たし, まあかつ(5-8)を満たす点 \hat{x} が \bar{x} の任意の近傍に得られる。

定理5-1から, 本論文で扱っている多段十字流抽出プロセスは, (5-9)を満たす閉集合の内部に最適点をもつ。

束縛条件(5-9)の内部のみについて探索すればよいことがわかったので, Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)^{7,8} に対するものと同じ1次元探索法が適用できる。

しかし, 境界上の P_- 値は, SUMT を用いた場合と異り $+\infty$ ではない。又, $x + \alpha x^i$, $\alpha > 0$ が (5-9)を満たす範囲で, $P_-(x + \alpha x^i)$ を最小化する α_{\min} を求めるとき, $x + \alpha_{\min} x^i$ が束縛境界上に定まることがありうる。しかし, この点は局所最小点ではない。

§6 平衡曲線型と不等号束縛条件の処理法統論

第3章§2で与えた抽出プロセスの平衡曲線は, Fig.3-1に見るように, 大略単調増加であり, $1/\phi(x)$ 曲線は大略単調減少函数である。 $\psi(x)(1/\phi(x))$ の形を厳密にみれば, ある区間で極めてわずかに減少(増加)する。その区間は0.1254 ~ 0.1354である。

第3章§2の抽出平衡曲線は, Aris, Rudd, & Amundson⁹ がグラフで与えたものを, 図上の曲線から行う数値微分は不正確なので, 5次曲線で近似したものであった。Aris et al.⁸ は平衡曲線の微細な増減については何も述べて

ならず、その与えたグラフからは、一部区間の減少を読みとることはできない。よって、第2章§2における平衡曲線式にみられる一部区間の減少傾向は、近似式の次数の制約からわずかに入ったものであろう。

従って、平衡曲線式(3-1)が厳密には単調増加でないことは、その減少区間と減少量が極くわずかであることも考えて、無視してさしつかえないであらう。

$\phi(x)$ が厳密に言えば単調増加でないことから議論に修正が必要になるのは、次の2ヶ所である。第1は、第3章で定理2-1の系2をもとに単峰性の発生の理論的根拠を検討している部分である。第2は本章前節の議論で、束縛領域の境界が局所最大にならないことの証明の部分である。

第1の部分については、 $\phi(x)$ を単調とみなして議論してさしつかえないとする上の論法に依る前に、次のことが指摘されるべきであらう。即ち、第3章で与えた局所最大点はそれぞれの点のベクトル成分中に、 $\phi(x)$ の減少区間の値を持つものがないことである。定理2-1の証明と系2の仮定をみると、区間 $[a, c]$ において $\Phi(x)$ がいかなる形をとっても、(2-59)はなりたち、又、区間 $[c, b]$ で $\Phi(x)$ がいかようであっても、(2-58)はなりたち。よって、 x_{k-1} が $\phi(x)$ の減少しはじめの点の値よりも小さな値をもてば、(2-60)のなりたちことは同じである。第1の点については、次の定理2-1の系3と、実際に得られた局所最大点のベクトル成分の値とから、結論修正の必要のないことが言える。

定理 2-1 系3

$a < c < d < \bar{c} < b$ であって、 $\Phi(x)$ が区間 $[a, c]$ と $[\bar{c}, b]$ とで単調増加、区間 $[c, \bar{c}]$ で単調減少。 $\Phi(x)$ が $[a, d]$ で単調減少、 $[d, b]$ で単調増加とする。

このとき、

$$x_1 - x_0 \leq x_2 - x_1 \leq \cdots \leq x_{k-1} - x_{k-2} \quad (5-15)$$

$$x_k - x_{k-1} \geq x_{k+1} - x_k \geq \cdots \geq x_{n+1} - x_n \quad (5-16)$$

$$\max_i (x_i - x_{i-1}) = x_k - x_{k-1} \text{ or } x_{k-1} - x_{k-2}, \\ i = 1, \cdots, n+1 \quad (5-17)$$

ただし、 $x_0 = a$, $x_{k+1} = b$, $x_i < x_{i+1}$ であり、かつ系2と異り、 $x_{k-1} < c$, $x_k > \bar{c}$ とする。

さて、さきの第2の点について、 $\phi(x)$ が厳密には単調増加でないことを考慮したとき、前節の議論がいかになるかを考える。結論としては、前節の議論は全面的にはなりたたない。しかしながら、束縛条件を満たす領域の境界上に

局所最適解が存在しても、むしろこれを捨去すべきであろう。なぜなら、そこに局所的最適解があるとしても、そのことは平衡曲線式の近似誤差の結果として生じたと考えられるからである。よって、束縛領域境界に局所最適点が存在しないとする前提の下に計算してよいとした前節の結論は修正の必要はないであろう。

本節で問題にしたところの、平衡曲線を多項式近似したときに単調性が失われるという事態は、上で第1、第2の2つの議論の修正箇所に関連して、次の面からみても重要である。

即ち、曲線の多項式近似は函数値の一致をよくする係数をえらぶだけでは、不可なことがある。問題としている $\phi(x)$ 曲線については多項式の勾配に課せられるべき制約を満たすようになされなければならない、ということである。これを考慮に入れなかったためにここでの議論についてみれば、 $\phi'(x) < 0$ となる区間がいささかでも生じ、最適化問題の性質が複雑となって、最適化問題に対する見通しを損うこととなったのである。

References

- 1 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 2 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.
- 3 Fletcher, R., and Reeves, C.M.: Function minimization by conjugate gradients, Computer Journal, Vol.7, 1964, pp.149-154.
- 4 Sayama, H., and Oi, K.: Optimal design of extraction processes by gradient methods, Memoirs of the School of Engineering, Okayama University, Vol.3, 1968, pp.23-29.
- 5 高松, 佐山, 大井: 2次収束グラジエント法による抽出プロセスの最適設計, 制御工学, Vol.13, 1969, pp.313-321.
- 6 Booth, A.B., (寺田川, 中村 訳): 数値計算法, コロナ社, 東京, 1965, pp. 107-114.
- 7 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, A primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 8 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: Computational algorithm for the sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, Management Science, Vol.10, 1964, pp.601-617.
- 9 Aris, R., Rudd, D.R., and Amundson, N.R.: On optimum cross-current extraction, Chemical Engineering Science, Vol.12, 1960, pp.88-97.

第6章 温度に上限下限のある多段反応槽列系の Newton法とSequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)に よる最適化

§1 序

本章では、次節で述べる多段反応プロセス最適化問題で、反応槽内温度に上限下限のあるものを扱う。¹ 束縛条件の処理は、第I篇第6章に述べたSequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)^{2,3}によっており、これにより束縛条件のない問題に変換された後の目的函数の最適化はNewton法によった。又、Newton法との比較のため、最急降下法によっても計算している。

本章では、まず束縛条件付の問題がSUMTにより、束縛条件のない最適化問題に容易におきかえられることを示す。次にNewton法が、2次形式でなく、さらに凸でもない目的函数について、どの程度効果的であるかを比較する。又、SUMTの双対問題が探索手順全体の終止の良い規準を与えることを明らかにする。

本章は、プロセス最適化問題を容易に、かつ少ない計算時間で解くための技法として、SUMTとNewton法の結合を提示し、その効果を明らかにするとともに、計算上の難点の処理法を述べたものである。さらに、第7章の準備としての有限次元空間における束縛条件処理をSUMTで行う例を示したものである。

§2 反応プロセスモデルと最適化問題

本章でとりあげるプロセスは、等しい滞留時間 τ をもつ n 段の反応槽列において、 $A \rightarrow B \rightarrow C$ 型逐次反応を行うものである。 B は目的生成物であり、 C は廃生成物である。又、 $A \rightarrow B$ は2次反応、 $B \rightarrow C$ は1次反応とする。

問題は次の函数を最小にする各段温度 T_i を求めることである。

$$f(T) = -(b_n + p a_n) \quad (6-1)$$

ここに, a_i, b_i は第 i 段の A, B の濃度であり, P は A と B の価格比である。

$$\frac{A \text{ の価格}}{B \text{ の価格}} = P \quad (6-2)$$

(6-1) では, 未反応物質 A にも価値を認めていることになる。
又, 次の温度制限が束縛条件として存在するとしている。

$$T^* \geq T_i \geq T_* \quad (6-3)$$

この最適化問題は Denn & Aris^{4,5} によって扱われている。
 i 段 ($i=1, 2, \dots, n$) のプロセス方程式は,

$$a_{i-1} - a_i - \tau k_1 a_i^2 = 0 \quad (6-4)$$

$$b_{i-1} - b_i + \tau k_1 a_i^2 - \tau k_2 b_i = 0 \quad (6-5)$$

ただし

$$k_1 = k_{1\infty} \exp(-E_1/RT_i) \quad (6-6)$$

$$k_2 = k_{2\infty} \exp(-E_2/RT_i) \quad (6-7)$$

最適化問題の数値として, 次のものをとった。

$n=2$, $k_{1\infty} = 5 \times 10^{10} \text{ liters mole}^{-1} \text{ min}^{-1}$, $k_{2\infty} = 3.30 \times 10^{17} \text{ min}^{-1}$,
 $E_1 = 18 \text{ kcal}$, $E_2 = 30 \text{ kcal}$, $P = 0.3$, $\tau = 6 \text{ min}$, $a_0 = 1 \text{ mole liter}^{-1}$,
 $b_0 = 0 \text{ mole liter}^{-1}$ 。

束縛条件式(6-3)の T^* , T_* の値の組は次の 2 通りをとった。

CS 1: $T^* = 370^\circ \text{K}$, $T_* = 346^\circ \text{K}$

CS 2: $T^* = 342^\circ \text{K}$, $T_* = 318^\circ \text{K}$

Fig. 6-1 によれば, $f(T) = -(b_2 + P a_2)$ は束縛条件 CS 1 を満たす領域, あるいは束縛条件を考慮しないときの最小点の近傍において凸である。又, 束縛条件 CS 2 を満たす領域では凸ではなく, CS 2 の下での最小点の近傍については凸である。

又, Fig. 6-1 から知られるように, CS 1 下の $f(T)$ の最小点は $(T_1, T_2) = (346.5^\circ \text{K}, 346.0^\circ \text{K})$, CS 2 の下では $(T_1, T_2) = (342^\circ \text{K}, 342^\circ \text{K})$ である。

§3 数値解法と計算結果の検討

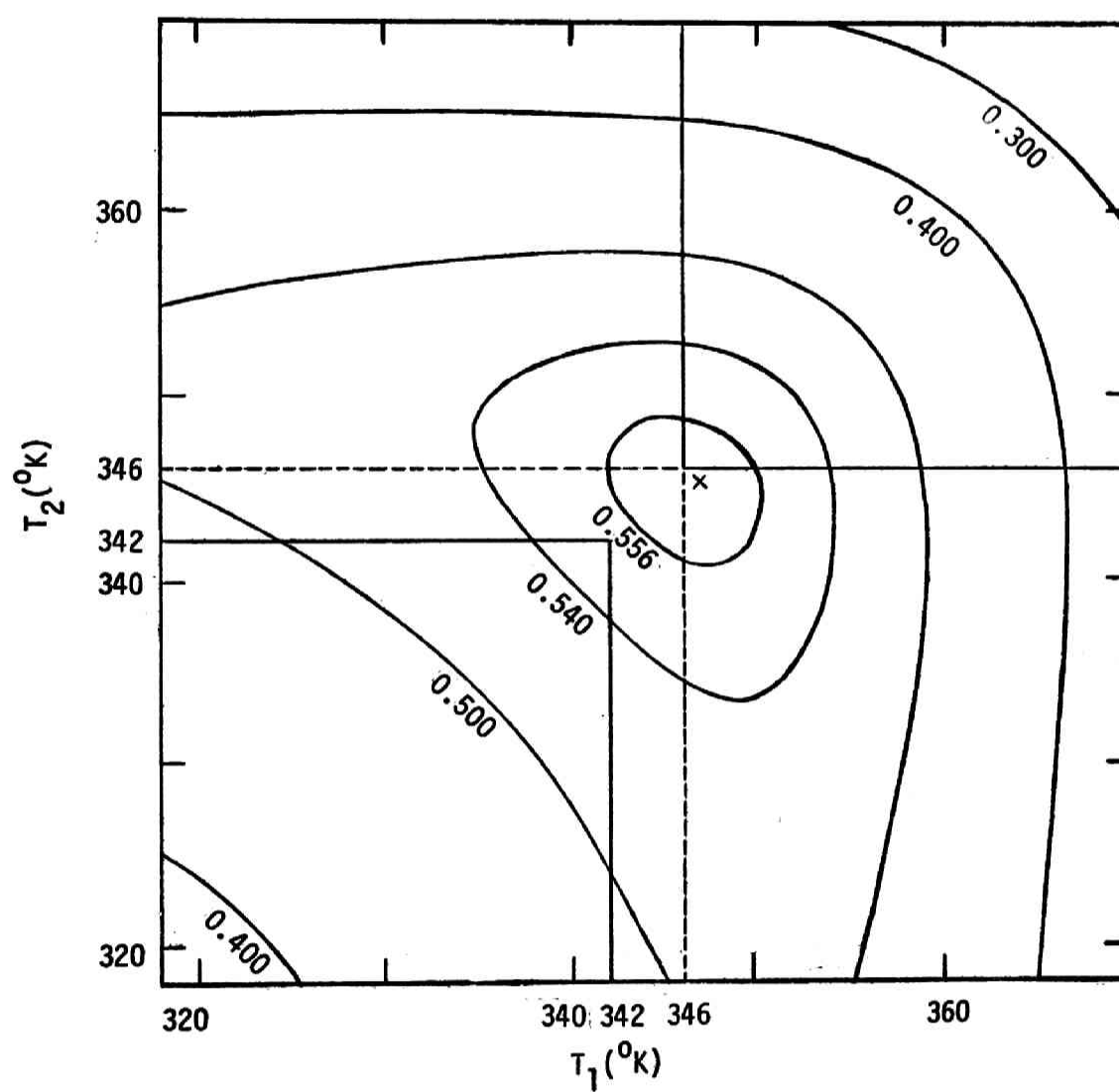


Fig. 6-1 Isovalue contour lines of profit function, $b_2 + pa_2$

前節の問題を解くために、以下の方法によった。

束縛条件の処理は、SUMTによる。問題は束縛条件の課されていない次の函数の最適化問題を解くこととなる。

$$P(T, r_i) = -(b_2 + \rho a_2) + r_i \left\{ \frac{1}{(T^* - T_1)} + \frac{1}{(T_1 - T_*)} + \frac{1}{(T^* - T_2)} + \frac{1}{(T_2 - T_*)} \right\} \quad (6-8)$$

r_i の列, $\{r_i\}$ は、次式により定めた。

$$r_i / r_{i+1} = C, \quad C = 20 \quad (6-9)$$

r_1 を定めるためには、(6-10)により、これが負値を与えたとき、(6-11)によった。これらの式は、Fiacco & McCormick³による。

$$r_1 = -\nabla f(T^0)^T \nabla P(T^0) / \|\nabla P(T^0)\|^2 \quad (6-10)$$

$$r_1 = \left(\frac{\nabla f(T^0)^T H_P^{-1} \nabla f(T^0)}{\nabla P(T^0)^T H_P^{-1} \nabla P(T^0)} \right)^{1/2} \quad (6-11)$$

ここに T^0 は探索出発点温度、 H_P は函数 $P(T)$ の T^0 におけるHessian行列である。

$$P(T) = \sum_{j=1}^m \frac{1}{g_j(T)}, \quad m=4$$

$$= \frac{1}{(T^* - T_1)} + \frac{1}{(T_1 - T_*)} + \frac{1}{(T^* - T_2)} + \frac{1}{(T_2 - T_*)} \quad (6-12)$$

1次元探索は、第I篇第1章に述べたバイナリー法によって、探索方向 d^i における $\phi(T)$ の最小点を挟む方法によった。

グラジエント法としては、Newton法と最急降下法によっている。ある r_i に対する $P(T, r_i)$ のグラジエント法による最小化の探索繰返しの終止規準は $\|\nabla P(T, r_i)\| < \varepsilon_1$ をとった。

束縛条件CS1の下でのNewton法と最急降下法による探索繰返しの経過をFigs. 6-2, 6-3に与える。探索出発点は $(T_1, T_2) = (348^\circ\text{K}, 348^\circ\text{K})$ である。又、 $\varepsilon_1 = 10^{-5}$ としている。Tables 6-1, 6-2に解に到達するまでの諸量の値の経過を示している。 r_6 に対して、最急降下法で計算する際、1次元探索における試行点間距離 $\|x^{i+1} - x^i\|$ が過小になり、計算の継続が不可能になった。これは、Figs. 6-2, 6-3にみるように、最急降下法では探索経路のジグザグが細く、そのため試行点間距離がNewton法よりも小になる傾向がある

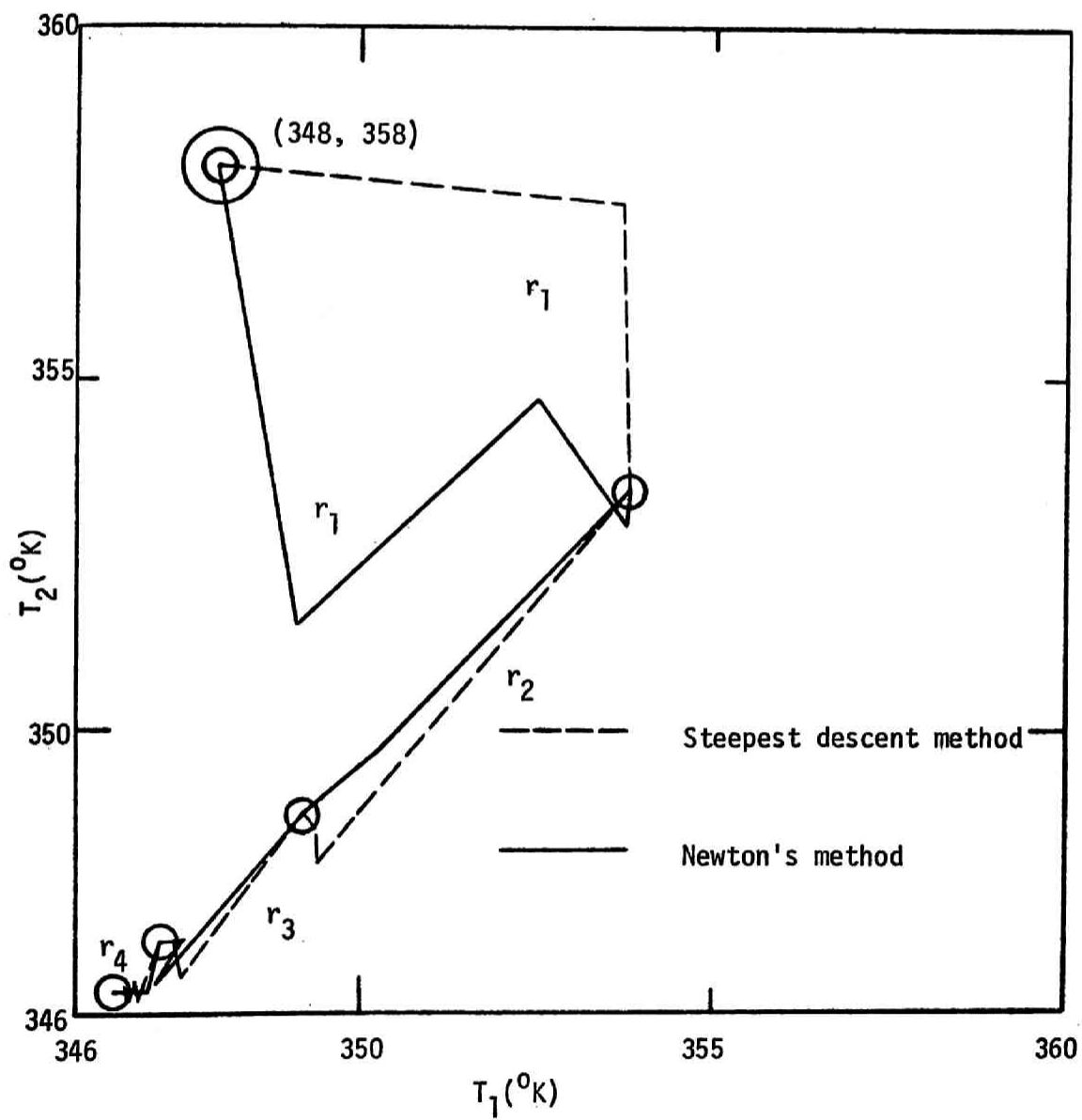


Fig. 6-2 Iteration trajectories, r_1 - r_4 .

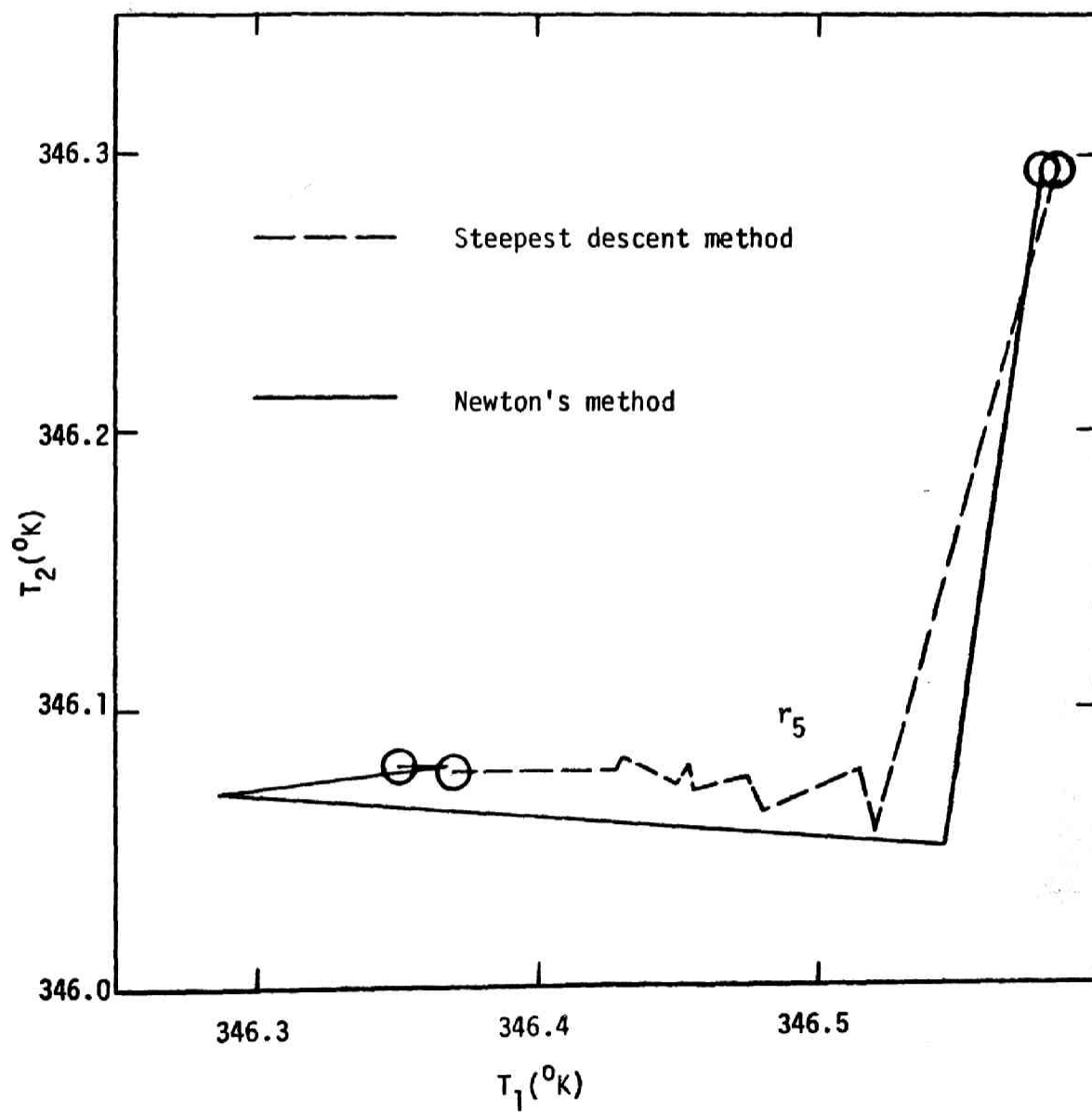


Fig. 6-3 Iteration trajectories, r_5

Table 6-1 Computer solution by steepest descent method

| | r | * | ** | $ \nabla P \times 10^{+5}$ | P | f | G | $ (f-G)/G $ | T_1 | T_2 |
|---|------------------------|----|----|-----------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------------------|---------|---------|
| 1 | 0.468 | 5 | 5 | 0.92 | -0.332446 | -0.512508 | -0.692571 | 0.26 | 353.858 | 353.392 |
| 2 | 0.234×10^{-1} | 5 | 10 | 0.31 | -0.534780 | -0.552288 | -0.569796 | 0.31×10^{-1} | 349.280 | 348.877 |
| 3 | 0.117×10^{-2} | 6 | 16 | 0.31 | -0.556560 | -0.558737 | -0.560914 | 0.39×10^{-2} | 347.319 | 346.985 |
| 4 | 0.585×10^{-4} | 9 | 25 | 0.20 | -0.559387 | -0.559690 | -0.559993 | 0.54×10^{-3} | 346.584 | 346.296 |
| 5 | 0.293×10^{-5} | 10 | 35 | 0.91 | -0.559794 | -0.559841 | -0.559888 | 0.83×10^{-4} | 346.370 | 346.076 |

*Moves Required to Minimize $P(x, r)$.

**Cumulative Number of Moves

Table 6-2 Computer solution by Newton's method

| | r | * | ** | $ \nabla P \times 10^{+5}$ | P | f | G | $ (f-G)/G $ | T_1 | T_2 |
|---|------------------------|---|----|-----------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------------------|---------|---------|
| 1 | 0.468 | 6 | 6 | 0.47 | -0.332446 | -0.512477 | -0.692508 | 0.26 | 353.859 | 353.396 |
| 2 | 0.234×10^{-1} | 4 | 10 | 0.32 | -0.534780 | -0.552289 | -0.569799 | 0.31×10^{-1} | 349.279 | 348.877 |
| 3 | 0.117×10^{-2} | 4 | 14 | 0.21 | -0.556560 | -0.558738 | -0.560915 | 0.39×10^{-2} | 347.316 | 346.986 |
| 4 | 0.585×10^{-4} | 4 | 18 | 0.30 | -0.559387 | -0.559691 | -0.559995 | 0.54×10^{-3} | 346.582 | 346.295 |
| 5 | 0.293×10^{-5} | 4 | 22 | 0.67 | -0.559795 | -0.559842 | -0.559889 | 0.84×10^{-4} | 346.352 | 346.076 |
| 6 | 0.146×10^{-6} | 3 | 25 | 0.56 | -0.559861 | -0.559870 | -0.559879 | 0.16×10^{-4} | 346.330 | 346.018 |
| 7 | 0.731×10^{-8} | 2 | 27 | 0.51 | -0.559875 | -0.559877 | -0.559878 | 0.33×10^{-5} | 346.332 | 346.004 |
| 8 | 0.366×10^{-9} | 2 | 29 | 0.60 | -0.559878 | -0.559878 | -0.559878 | 0.74×10^{-6} | 346.332 | 346.001 |

ためと考えられる。Newton法においては、 r_8 に対する計算までが行われた。

Table 6-3 に他の出発点から、CS 1の下で探索したときの繰返し回数が掲げられている。

Tables 6-1 ~ 6-3 によって、Newton法が最急降下法よりも各 r_i に対する $P(T, r_i)$ の解 $T^*(r_i)$ に到達する探索繰返し数の和が少なく、 r_5 に対する計算が終るまでに要する繰返し回数は、大略半数であることが知られる。

最適解に到達するまでの P , φ の値とSUMTの双対問題の函数 G の値との繰返し回に対する変化状況がFig. 6-4に図示してある。Fig. 6-4によって、双対問題の函数 G の値が、この計算例において、 r_i 減少繰返しの打切りについて良い規準を与えていることがわかる。Table 6-2 にみるように、Newton法によれば、 r_5 に対して探索を終止したとき、 P , φ , G の値は5桁まで一致しており、 r_8 に対しては、7桁まで一致している。

次に束縛条件CS 2の下、即ち、束縛領域内で函数 φ が凸にならない場合でのNewton法の挙動について述べる。この領域についても、ペナルティ項(6-12)は凸である。

出発点を $(T_1, T_2) = (320^\circ\text{K}, 320^\circ\text{K})$ とする。初回の T の推定式(6-11)によって求められた値の $1/10$ と $1/100$ を、ここでは r_1 として採用して比較する。それぞれ r_1 を r_{1-10} , r_{1-100} で表わす。 r_{1-100} に対しては、出発点での $P(T, r_1)$ のHessian行列が正定値にならない。そして、 $P(T, r_1)$ の最小化を行おうとしているにも拘らず、函数の増加方向である $d \doteq (-1, -1)$ を探索する。一方、 r_{1-10} に対しては、出発点での $P(T, r_1)$ のHessian行列が正定値となる。そして、出発点から $d \doteq (1, 1)$ 方向を探索し、 r_{1-10} に対する第1回目の試行で $(340^\circ\text{K}, 340^\circ\text{K})$ 附近に至り、以下 r_i の減少を経て解へ収束している。

ここで問題となることは、SUMTにおいて φ が凸でなく、 P が凸であるときのNewton法の挙動である。上の計算例は出発点の近傍で φ が凹であって、束縛領域内での最小点近傍で φ が凸のときについてのものである。このとき、ペナルティ項の重み τ の初期値 r_1 の値によって解に到達したり、しなかったりする。

r_1 が小さすぎると、出発点での $P(T, r_1)$ のHessian行列が正定値でなくなり、 r_1 を大にするとペナルティ項の凸性が利いて、正定値となる。

もとより、 $\{r_1\}$ なる列は単調減少すべきものであるから、SUMTが要求する最適化問題の条件のすべてが満たされていれば、 r_1 は過大でない方が、充分小な τ との差が小となって全計算過程の打切りも少ない計算時間の後に行えることが期待される。上の例では、SUMTが要求する条件を最適化問題がすべては満たしていないため r_1 を過小に取るにより、障害を生じている。そして、 r_{1-10} に対しては、この r_{1-10} で計算している間に φ が凸な最小点近傍の領域に試行点を得て、以下 r_i の減少を行っても、最小点近傍では φ が凸なので解へ収束している。

Table 6-3 Number of iterations vs. initial starting points

| | | |
|------------------------------|-------|--------|
| T_1 ($^{\circ}\text{K}$) | 358 | 368 |
| T_2 ($^{\circ}\text{K}$) | 348 | 368 |
| r_1 | 0.397 | 0.0378 |

| | | | | |
|-----------------|----|----|----|----|
| gradient method | SD | N | SD | N |
| 1 | 6 | 6 | 5 | 4 |
| 2 | 5 | 4 | 5 | 5 |
| 3 | 6 | 3 | 6 | 4 |
| 4 | 9 | 3 | 17 | 4 |
| 5 | 22 | 3 | 13 | 3 |
| total | 48 | 19 | 46 | 20 |

SD: Steepest descent method

N : Newton's method

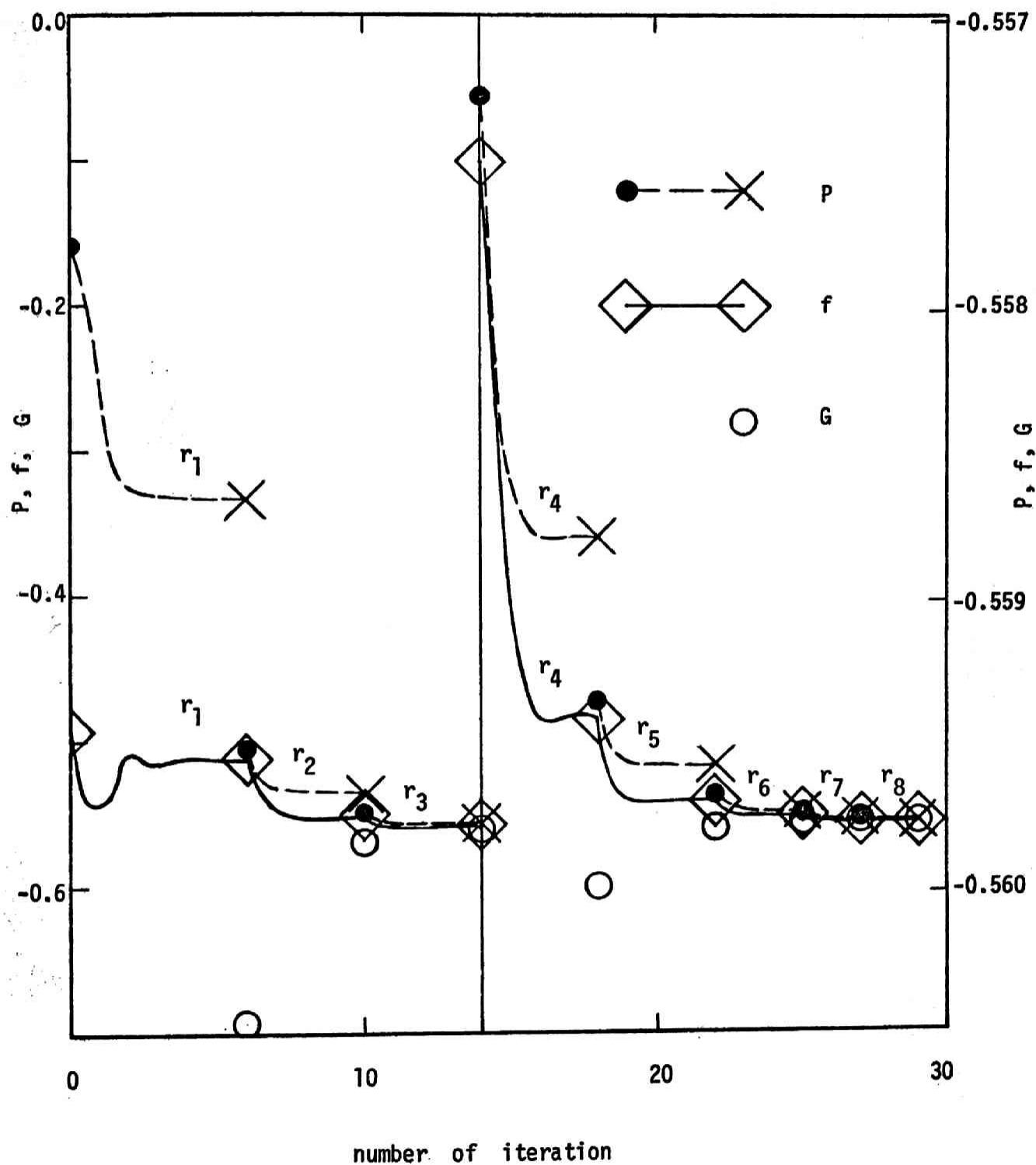


Fig. 6-4 Successive approximations to the optimal solution value

結論として、CS 2 の場合の計算から言えることは、原目的函数 f が凸でなくとも、ペナルティ項の P 函数が凸ならば、SUMT によって解を得ることがある。そして、SUMT によって解を求めるとき、試行点で P 函数の Hessian 行列が正定値になるように r を取れば、Newton 法によって解を得ることができる。これはペナルティ項の r の大きさによって、函数 P の形状を或る程度調節できるからである。ただし、 r_1 は過大に取ってはならないので、 f が凸でないとき、慎重に試行錯誤を行って r_1 を決めるべきである。

SUMT, Newton 法などは、その理論を簡潔で洗練されたものとするために、強い条件を最適化問題に対して要求する。プロセスにおける問題にみられるように、この条件が満たされない問題を解くときには、計算中に函数の形状を推定して計算すれば正しい解が求められることがあるといえる。このことは、代数方程式の根を求めるとき、方程式の函数の概形を知っていれば、所期の根が得やすいことに似ている。

計算機の手法としては、第 I 篇第 1 章 § 8 にい} MAC (Machine Aided Computation 又は Multiple Access Computer) システムの利用が有効であろう。

以上に示したこと、特に CS 1 の下での計算例により、SUMT と Newton 法は組合せて使用することによって束縛条件処理が簡単にできて、解に到達するまでに要する計算時間の少ない最適化計算法が得られることがわかる。

この計算例における反応槽段数 $n=2$ に対しても、目的函数 f の 2 階偏導函数の式の導出はかなり面倒である。 n が大なるときは、共軛勾配法, Davidon-Fletcher-Powell 法^{6,7} など 1 階の偏導函数のみを必要とする方法が、より実用的となるであろう。

References

- 1 Sayama, H., and Oi, K.: Optimal design of chemical process by nonlinear programming technique, Memoirs of the School of Engineering, Okayama University, Vol.2, 1967, pp.30-34.
- 2 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, A primal-dual method, Management Science, Vol.10, 1964, pp.360-366.
- 3 Fiacco, A.V., and McCormick, G.P.: Computational algorithm for the sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, Management Science, Vol.10, 1964, pp.601-617.
- 4 Denn, M.M., and Aris, R.: Green's functions and optimal systems Necessary conditions and an iterative technique, I&EC Fundamentals, Vol.4, 1965, pp.7-16.
- 5 Denn, M.M., and Aris, R.: Green's functions and optimal systems The gradient direction in decision space, I&EC Fundamentals, Vol.4, 1965, pp.213-222.
- 6 Davidon, W.C.: Variable metric method for minimization, AEC Research and Development Report, ANL-5990 Rev., 1959.
- 7 Fletcher, R., and Powell, M.J.D.: A rapid convergent descent method for minimization, Computer Journal, Vol.6, 1964, pp.163-168.

第7章 温度に上限下限のある管型反応器系の Davidon-Fletcher-Powell 法と Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT)による最適化

§1 序

本章では、§2で規定する管型反応プロセスの最適化問題で管内温度に上限と下限のあるものを扱う。束縛条件の処理には、第I篇第6章§3で述べた函数空間における Sequential Unconstrained Minimization Technique (SUMT) によっている。SUMTによって、束縛条件のない問題に変換されたのちの目的函数の最適化計算は、第I篇第5章の函数空間に拡張された Davidon-Fletcher-Powell 法 (DFP 法)^{2,3}を適用し、そこで与えられた著者によって開発された計算機構⁴を用いている。又、解への到達の速さを比較するため、最急降下法によっても計算している。

本章の第1の目的は、DFP法とSUMTの結合による束縛条件付きの反応プロセス最適化問題の解法を示すと共に、SUMTと組合わされたDFP法の計算法としての有効性を数値的に実験することにある。

§3に述べることであるが、本章の数値計算結果についてみると、DFP法の解に到達するまでの探索繰返し回数が最急降下法よりも常に少なくすむとはいえない。このようなことは、少ない計算量で解を見出すことをDFP法に期待する上で、面倒な問題である。§3においては、DFP法と最急降下法との解への到達の速さがいかなる条件によって変わるかを、数値実験結果から検討する。

§2 反応プロセスモデルと最適化問題

本章でとりあげるプロセスは保持時間が一定となるピストン流れの管型反応器である。反応は、前章と同じく $A \rightarrow B \rightarrow C$ 型逐次反応である。Bは目的生成物、Cは廃生成物である。 $A \rightarrow B$ 、 $B \rightarrow C$ なる反応はそれぞれ、2次反応、1次反応である。

最適化問題は

$$\phi(x_f, t_f) = -(x_2(t_f) + \rho x_1(t_f)) \quad (7-1)$$

を最小ならしめるように、反応管内温度分布 $u(t)$ を決めることにある。ただし、 $x_1(t)$, $x_2(t)$ はそれぞれ、流入より時間が $t-t_0$ 経過した反応物質の A, B 成分の濃度である。

反応温度 $u(t)$ には上限と下限があって、次式で与えられる。

$$u_* \leq u(t) \leq u^* \quad (7-2)$$

(7-1) は末反応物質にも価値を認めたものであって、 ρ は A と B の価格比であることは前章の目的函数に同じである。

プロセス方程式は次の如くなる。

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_{1\infty} \exp(-E_1/Ru) x_1^2 \\ \frac{dx_2}{dt} = k_{1\infty} \exp(-E_1/Ru) x_1^2 \\ \quad - k_{2\infty} \exp(-E_2/Ru) x_2 \end{cases} \quad (7-3)$$

$$\begin{cases} x_1(t_0) = x_{10} \\ x_2(t_0) = x_{20} \end{cases} \quad (7-4)$$

このプロセス最適化問題は Denn & Aris^{5,6} によって他の方法を用いて解かれている。

(7-1), (7-2) を, SUMT の $P(u, r)$ 函数により, 束縛条件のない目的函数で書き表わす。

$$P(u, r) = \phi(x_f, t_f) + r \sum_{i=1}^2 \int_{t_0}^{t_f} \frac{1}{g_i(x, u, t)} \quad (7-5)$$

ただし,

$$\begin{cases} g_1(x, u, t) = u^*(t) - u(t) \\ g_2(x, u, t) = u(t) - u_*(t) \end{cases} \quad (7-6)$$

問題は, (7-5) を (7-3), (7-4), (7-6) の下で最小化することとなった。

この問題の Hamiltonian を求める。

$$H(x, p, u, t) = r \left\{ \frac{1}{(u^* - u)} + \frac{1}{(u - u_*)} \right\} - p_1 k_1 x_1^2 + p_2 (k_1 x_1^2 - k_2 x_2) \quad (7-7)$$

ただし,

$$\begin{cases} k_1 = k_{1\infty} \exp(-E_1/Ru) \\ k_2 = k_{2\infty} \exp(-E_2/Ru) \end{cases} \quad (7-8)$$

$p = (p_1, p_2)^T$ は随伴ベクトルを表わす。

$$\begin{cases} \frac{dp_1}{dt} = 2k_1 x_1 (p_1 - p_2) \\ \frac{dp_2}{dt} = k_2 p_2 \end{cases} \quad (7-9)$$

$$\begin{cases} p_1(t_f) = -p \\ p_2(t_f) = 1 \end{cases} \quad (7-10)$$

目的函数(7-6)のグラジエントベクトルは,

$$\begin{aligned} g(u) &= \frac{\partial H}{\partial u} \\ &= r \left\{ \frac{1}{(u^* - u)^2} + \frac{1}{(u - u_*)^2} \right\} \\ &\quad - (p_1 - p_2) x_1^2 k_1 E_1 / R u^2 - p_2 x_2 k_2 E_2 / R u^2 \end{aligned} \quad (7-11)$$

計算に用いた数値は下に述べる通りである。^{5,6} $k_1 = 5 \times 10^{10} \text{ liters mole}^{-1}$, $k_2 = 3.33 \times 10^{17} \text{ min}^{-1}$, $E_1 = 18 \text{ kcal}$, $E_2 = 30 \text{ kcal}$, $t_0 = 0$, $t_f = 6 \text{ min}$, $p = 0.3$, $x_{10} = 1 \text{ mole liter}^{-1}$, $x_{20} = 0 \text{ mole liter}^{-1}$, $u_* = 335^\circ \text{K}$ とし, u^* については, $346 \sim 355^\circ \text{K}$ のいくつかの値について計算した。

§3 計算結果とその解釈

U^* を346, 350, 355°K にとったときのDFP法, 最急降下法の探索繰返し回数に対する目的汎函数(7-5)の値の関係をFigs. 7-1 ~ 7-3に与える。この例においては, 探索出発点は, $U^0(t) \equiv 345^\circ\text{K}$ である。

r の値は, $r_1 = 10^{-6}$ をとっている。この r 値は, この問題に対しては小さな値となっていて, 束縛条件下の真の解にかなり近い解に到達していると考えられる。このため, 又, 本章の目的がDFP法と最急降下法の比較などの計算法の有効性の比較にあるため, r_1 , 即ち r の初回値に対する計算結果のみを与える。

Fig. 7-1にみるところでは, 探索1回目からDFP法が小さな汎函数値を与えており, 終始最急降下法より小さな値をとり続けて急速に収束している。

Fig. 7-2にみるところでは, はじめの方の探索回では最急降下法が遙かに小さな汎函数値を与えているが, 途中の或る回の探索でDFP法による計算が大幅な汎函数値減少傾向をみせ, 結果としては, DFP法が有効となっている。

Fig. 7-3によれば, Figs. 7-1, 7-2 にみるところと異り, 最急降下法が, DFP法よりも終始はるかに小さな汎函数値を与えており, 最急降下法が, より有効となっている。

Fig. 7-3に与えられた結果は, DFP法の使用上, 面倒な問題を提起する。DFP法は理論上も計算手順上も最急降下法より複雑であり, 計算機の記憶量, 1回の探索に要する時間も多し。DFP法を使用するのは, 急速な解への到達を期待しているからであり, 計算が期待通りに急速な解への収束をもたらさなくとも, 最急降下法よりも速く解に到達することが望ましい。Fig. 7-3はそのようにならない例となっている。

第I篇第5章において, DFP法の函数空間への拡張法の計算機構について論じるとき, 解へ到達するまでに非常に多くの探索繰返しを要する場合を想定している。Fig. 7-3によっても, そのような場合を想定する必要があることが知られるであろう。

DFP法の有効性の変化を調べると, Figs. 7-1 ~ 7-3によれば, U^* 値が小なるほど, 最急降下法より有効となっている傾向がみられる。この傾向は(7-5)のペナル項が原目的函数(7-1)の形状に与えた「ゆがみ」によって生じたとみられよう。そして, このことは, 函数空間に拡張されたDFP法を一般の非線型目的函数に適用するとき, この方法が有効に適用される汎函数形と然らざるものとの区別をする方法を導く手掛りになるとも考えられる。

本章の最適化問題に対し, U^* の値によってDFP法の有効性が左右されているということは, 次のことを意味する。即ち, DFP法に適する最適化問題とそうでないものとの区別は, 問題の種類によって定まるのではなく, 問題に含まれるパラメーターの値によっているということである。最適化問題のパラメーター値を大幅に変えれば, DFP法の解への収束の挙動が, その前と大幅に異なる

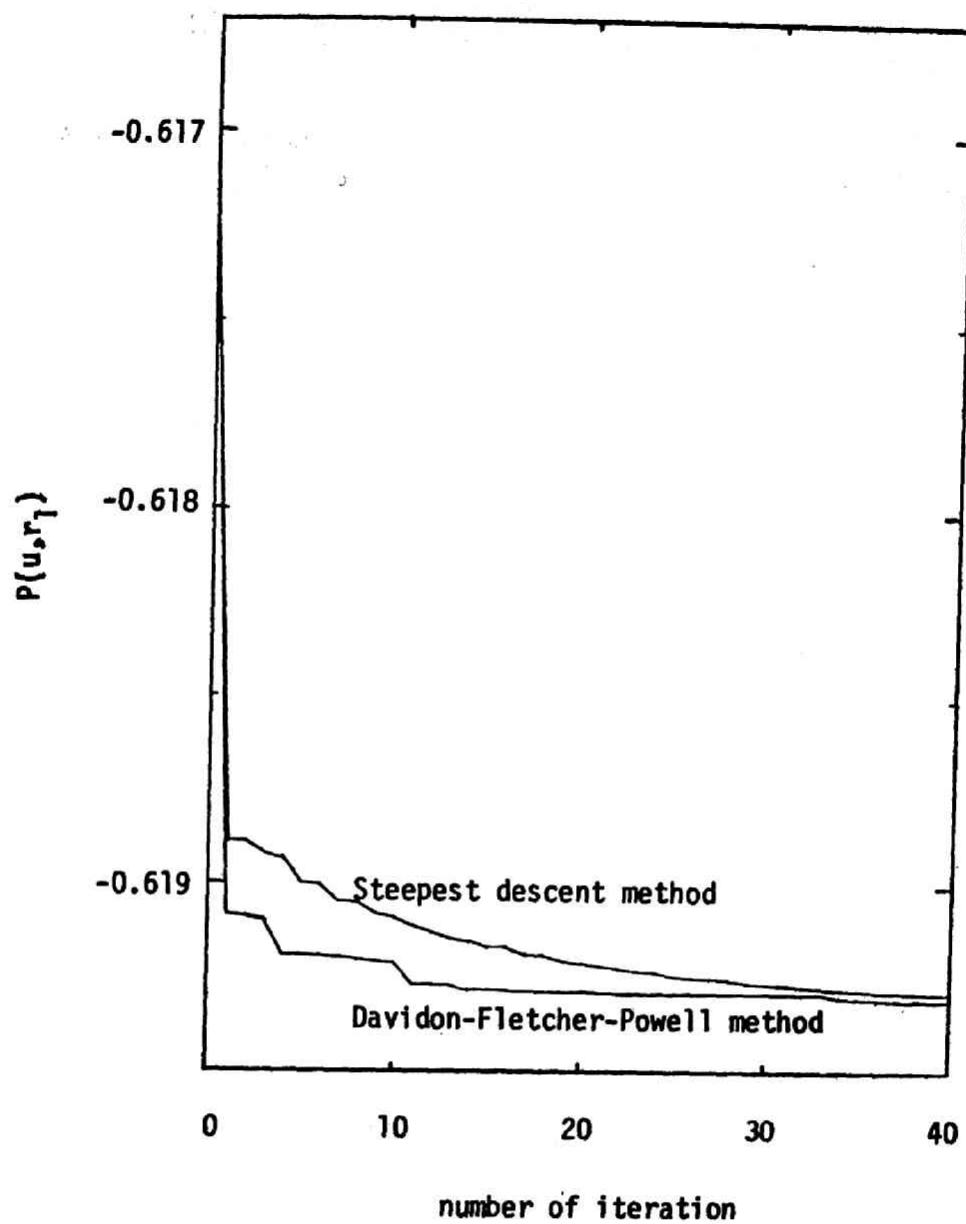


Fig. 7-1 Behaviour of objective functional $P(u, r_1)$ for $u^*=346^\circ\text{K}$

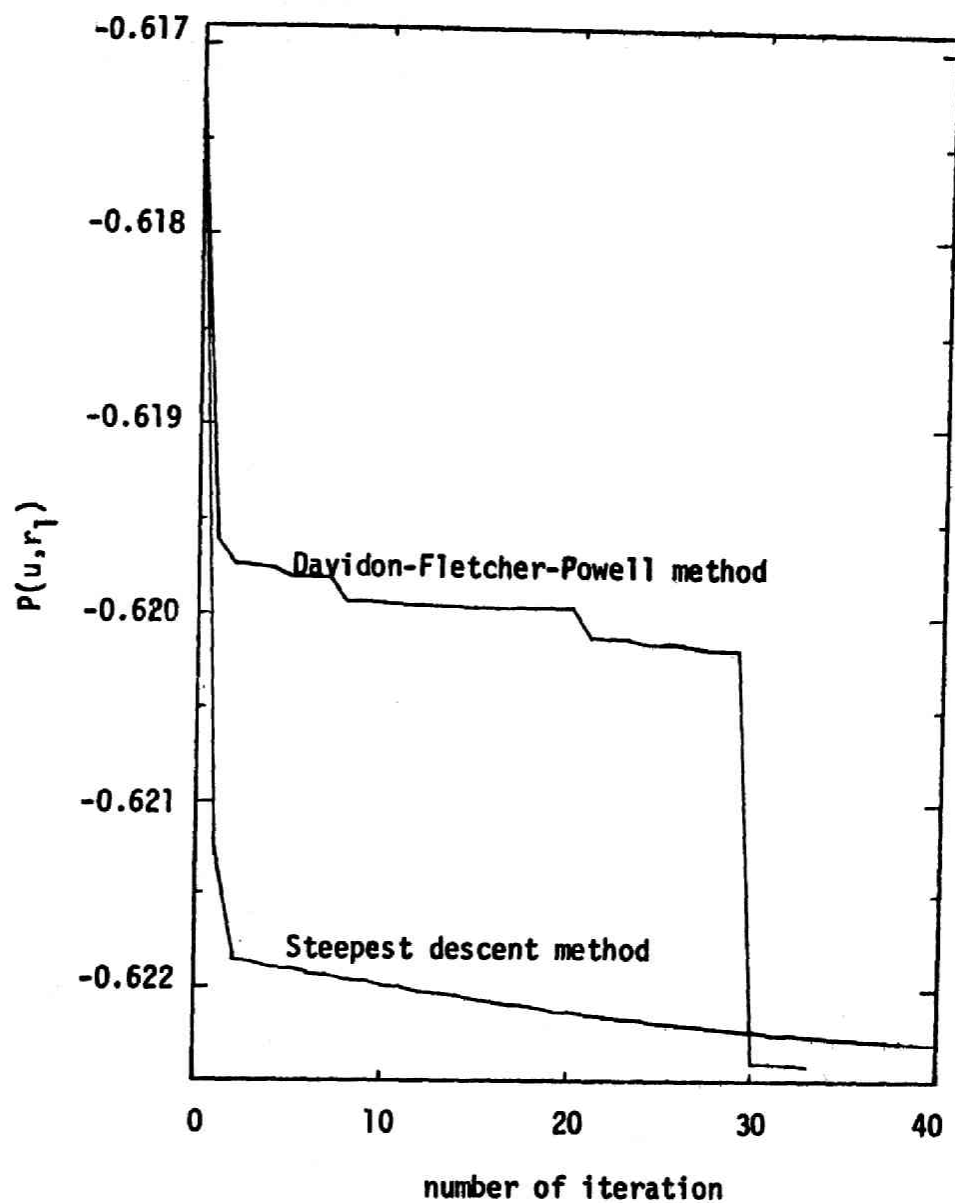


Fig. 7-2 Behaviour of objective functional $P(u, r_1)$ for $u^* = 350^\circ\text{K}$

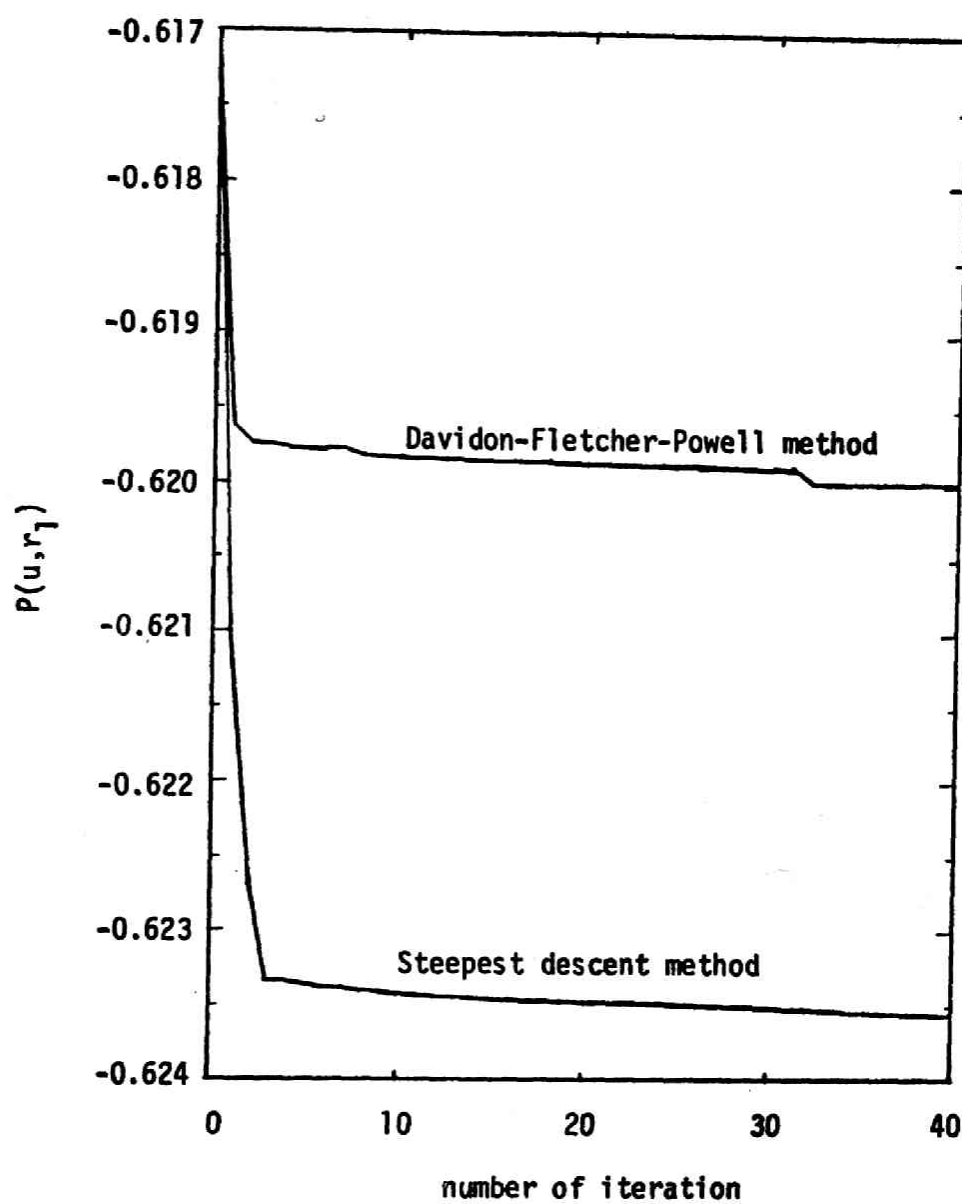


Fig. 7-3 Behaviour of objective functional $P(u, r_1)$ for $u^*=355^\circ\text{K}$

可能性があることになる。

Figs. 7-1, 7-2 第I篇第5章の計算例によっても、函数空間におけるDFP法の有効なことを期待して、最適化問題を解くためにこの方法を適用することができることが知られるが、この方法を実用化するまでには、DFP法の収束の挙動の変化傾向を中心に、より多くの数値実験の必要がある。

References

- 1 Lasdon, L.S., Waren, A.D., and Rice, R.K.: An interior penalty method for inequality constrained optimal control problems, IEEE Transactions on Automatic Control, Vol.AC-12, 1967, pp.388-395.
- 2 Horwitz, L.B., and Sarachik, P.E.: Davidon's method in Hilbert space, SIAM Journal Appl. Math., Vol.16, 1968, pp.676-695.
- 3 Tokumaru, H., Adachi, N., and Goto, K.: Davidon's method for minimization problems in Hilbert space with an application to control problems, SIAM Journal Control, Vol.8, 1970, pp.163-178.
- 4 Oi, K., Sayama, H., and Takamatsu, T.: Computational schemes of the Davidon-Fletcher-Powell method in infinite dimensional space, (未発表).
- 5 Denn, M.M., and Aris, R.: Green's functions and optimal systems Necessary conditions and an iterative technique, I&EC Fundamentals, Vol.4, 1965, pp.7-16.
- 6 Denn, M.M., and Aris, R.: Green's functions and optimal systems The gradient direction in decision space, I&EC Fundamentals, Vol.4, 1965, pp.213-222.

Nomenclature for Part II

Symbols that appear infrequently and in one section are not listed.

- A^i : one of linear operators which define linear operator H^{i+1} by $H^i + A^i + B^i$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- E_i : activation energy of chemical reaction.
- H^i : linear operator which defines one-dimensional search direction of $i+1$ th iteration by $H^i g^i$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- H^L : linear operator which defines one-dimensional search direction after the point x^L is attained.
- H_1^L : H^L corresponding to the starting point P_i , $i=1,2$.
- P : objective function of multistage process optimization.
- P_- : objective function defined that $P_- = - \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\rho} \phi(x_i) \right) (x_i - x_{i-1})$.
- $P(x, r_i)$: penalty function.
- R : gas constant.
- T : temperature.
- T_i : temperature of i th stage.
- T^* : upper bound of temperature.
- T_* : lower bound of temperature.
- a : end point of interval.

- a_i : concentration of chemical species A in i th stage of multistage chemical process.
- b : end point of interval.
- b_i : concentration of chemical species B in i th stage of multistage chemical process.
- d^i : one-dimensional search direction.
- g^i : gradient vector for the point x^i or u^i .
- $k_{i\infty}$: frequency factor of i th chemical reaction.
- l : longitudinal coordinate of the continuous extraction process.
- l_e : length of the continuous extraction process.
- n : the number of stages of the real multistage process or that of vector components.
- p : adjoint vector.
- p_i : i th component of adjoint vector.
- q : feed flow rate of the extraction process.
- $q(t)$: function which defines the consumption rate of raw material for inventory problem.
- r : recycle ratio of the extraction process.
- r_i : i th weighting value of penalty function.
- $r(x_i)$: reaction rate in i th vessel.
- t_0 : initial time.

- t_f : final time.
- t_{ij} : element of the Hessian matrix of function P_- .
- u : control vector.
- u_i : control variable for i th stage, especially for the extraction process feed rate of second solvent.
- u^* : upper bound of control u .
- u_* : lower bound of control u .
- $u(l)$: feed rate of second solvent for the continuous extraction process.
- v_j : eigenvector of matrix corresponding to λ_j .
- w_i : concentration of solute in second solvent which leaves i th stage of the extraction process.
- w_p : $\phi(x_p)$.
- $w(l)$: concentration of solute in second solvent which leaves the continuous extraction process.
- x : state vector.
- x_e : concentration of solute in first solvent at l_e for the continuous extraction process, $x(l_e)$.
- x_f : feed concentration of solute in first solvent.
- x_i : i th component of the state vector, especially for the extraction process concentration of solute in first solvent which leaves i th stage.
- x^i : point attained after i th iteration of search.

- x^L : point in the vicinity of the local optimum point attained after L iterations.
- x_i^L : i th component of x^L .
- x_0 : concentration of first solvent which enters the first stage of the extraction process, or the value of the initial point of interval a .
- x_ρ : $\phi^{-1}(\rho)$.
- \bar{x} : point on which the inequality constraints are active.
- \hat{x} : interior point of inequality constraints near \bar{x} .
- $x(L)$: concentration of solute in first solvent in the continuous extraction process.
- $\Phi(x)$: continuously differentiable and monotonically increasing function which determines the objective function P of the generalized multistage optimization problem, especially in the extraction problem $\Phi(x)=1/\phi(-x)$.
- $\Phi'(x)$: first derivative of function $\Phi(x)$.
- $\Phi''(x)$: second derivative of function $\Phi(x)$.
- γ^{i-1} : $g^i - g^{i-1}$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- λ_j : eigenvalue of matrix.
- ρ : price ratio.
- σ^{i-1} : $x^i - x^{i-1}$, (Davidon-Fletcher-Powell method).
- τ : residence time.
- τ_i : residence time of i th vessel.

$\phi(x)$: equilibrium curve function of the extraction process.

$\phi^{-1}(x)$: inverse function of $\phi(x)$.

Superscript

T : matrix transposition.

謝

辞

論文を終るに当って、著者は諸方面に感謝の言葉を述べなければならない。

本研究に着手する以前から今日に至るまで、要所を衝いた御指導と御批判をして下さった、京都大学教授高松武一郎先生、

著者が岡山大学工学部在任中直接指導に当られた岡山大学教授佐山隼敏先生

、著者に対する助言と討論を惜しまれなかった京都大学助教授橋本伊織先生、京都大学修士課程に著者が在学中、ゼミナールへの参加を許して下さり、親切にお教えいただいた京都大学助教授布川昊先生、

投稿論文について閲読し、又討論して下さいた京都大学助教授内藤正明先生、足立紀彦先生、島公脩先生、

これら諸先生方に深く感謝します。

数値計算の一部については海野均、中野秀則、江良嘉え、上野良雄の4君に岡山大学工学部在学中御協力いただいた。

そのほか、著者が本論文の研究をなした岡山大学工学部生産機械工学科の各位には一方ならないお世話になった。

これらの方々に感謝いたします。

本論文中的数値計算のために使用した計算機とその所属機関は、次の通りである。多用したのは、はじめの4箇所のものである。

岡山大学理学部電子計算機室

NEAC 2203

全国共同利用計算機センター

東京大学

HITAC 5020, 同E

京都大学

FACOM 230-60

大阪大学

NEAC 2200-500

岡山大学工学部電子工学科

FACOM 270-20

これらの計算機の所属機関の各位、ならびに共同利用計算機岡山大学連絡所の各位に感謝します。

